

JOANA B. O. QUANDT

**MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES COM RESTRIÇÕES CANALIZADAS
UTILIZANDO FALSAS HESSIANAS DE BANDA**

Tese apresentada para obtenção do título de
Doutor em Engenharia de Produção, no Programa
de Pós-Graduação em Engenharia de Produção da
Universidade Federal de Santa Catarina.

Orientador: Prof. Plínio Stange, Dr.
EPS-UFSC

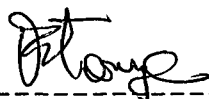
Co-orientador: Prof. José Mario Martínez, Dr.
DMA-UNICAMP

FLORIANÓPOLIS
1996

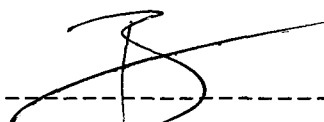
**Minimização De Funções Com Restrições Canalizadas
Utilizando Falsas Hessianas de Banda**

Joana Benedita de Oliveira Quandt

Esta tese foi julgada adequada para a obtenção do título de DOUTOR EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção.

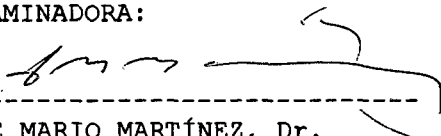


PROF. PLÍNIO STANGE, Dr.
ORIENTADOR



PROF. RICARDO MIRANDA BARCIA, Ph.D.
COORDENADOR DO CURSO

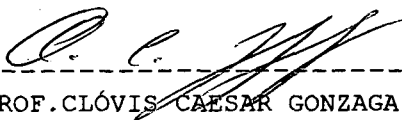
BANCA EXAMINADORA:



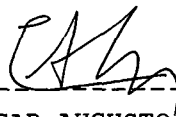
PROF. JOSÉ MARIO MARTÍNEZ, Dr.
EXAMINADOR EXTERNO



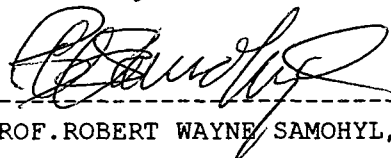
PROF^a. MARIA APARECIDA DINIZ-EHRHARDT, Dr.
EXAMINADOR EXTERNO



PROF. CLÓVIS CAESAR GONZAGA, Dr.



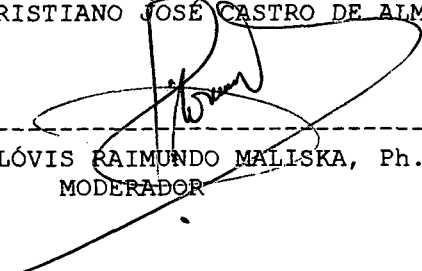
PROF. EDGAR AUGUSTO LANZER, Ph.D.



PROF. ROBERT WAYNE SAMOHYL, Ph.D.



PROF. CRISTIANO JOSÉ CASTRO DE ALMEIDA CUNHA, Dr.



PROF. CLÓVIS RAIMUNDO MALISKA, Ph.D.
MODERADOR

AGRADECIMENTOS

Agradeço

ao Prof. Plínio Stange, orientador no programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção da UFSC, pela amizade e pelo voto de confiança;

à Profa. Sandra A. Santos, do Departamento de Matemática da UNICAMP, por sua orientação quanto à utilização das rotinas vindas da UNICAMP;

ao Prof. Lício H. Bezerra, do Departamento de Matemática da UFSC, pelas inestimáveis discussões sobre Álgebra Linear Matricial e implementação do algoritmo;

ao Prof. Genaldo L. Nunes, do Departamento de Matemática da UFSC, pela sua disposição em resolver os inúmeros problemas surgidos na utilização da rede de computadores da UFSC;

ao Prof. Edgar A. Lanzer, do Departamento de Engenharia de Produção da UFSC, pelo apoio constante;

ao Prof. Ricardo M. Barcia, Coordenador da Pós-Graduação em Engenharia de Produção da UFSC, pela atenção e apoio;

aos colegas do Departamento de Matemática que sempre torceram pela conclusão deste trabalho; em especial a Miguel Pelandré Perez, Jane de O. Crippa e Neri T. Both Carvalho;

ao Waldir, ao Guilherme e ao Gustavo, pela compreensão nos meus inúmeros momentos de cansaço durante a elaboração deste trabalho; e em particular ao Gustavo pela valiosa orientação no trabalho de datilografia.

Agradeço especialmente

ao Prof. José Mario Martínez, do Departamento de Matemática Aplicada da UNICAMP, pela sugestão do tema e pelo acompanhamento sistemático da elaboração deste trabalho;

à Profa. Maria Aparecida Diniz-Ehrhardt, do Departamento de Matemática Aplicada da UNICAMP pela leitura paciente e atenta das duas primeiras versões dos quatro capítulos iniciais deste trabalho, pelas proveitosas sugestões e discussões.

SUMÁRIO

RESUMO.....	v
1 INTRODUÇÃO.....	1
2 MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES NÃO LINEARES COM RESTRIÇÕES DE CANALIZAÇÃO.....	5
2.1 UMA DESCRIÇÃO DE MÉTODOS DE REGIÃO DE CONFIANÇA E O MÉTODO DE FRIEDLANDER-MARTÍNEZ-SANTOS.....	5
2.2 APROXIMAÇÕES SECANTES E APROXIMAÇÕES DE BANDA PARA AS HESSIANAS.....	8
2.3 MÉTODO DE REGIÃO DE CONFIANÇA UTILIZANDO FALSAS HESSIANAS DE BANDA.....	11
2.4 PRINCIPAIS RESULTADOS DE CONVERGÊNCIA DO MÉTODO DE FRIEDLANDER-MARTÍNEZ-SANTOS.....	13
3 APROXIMAÇÕES DE BANDA PARA AS HESSIANAS.....	15
3.1 INTRODUÇÃO.....	15
3.2 CONSIDERAÇÕES SOBRE MATRIZES DE BANDA E SEU ARMAZENAMENTO COMPUTACIONAL.....	17
3.3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA PARA A OBTENÇÃO DA ATUALIZAÇÃO DA HESSIANA.....	19
3.4 RESULTADOS INTERMEDIÁRIOS.....	20
3.5 RESOLUÇÃO FORMAL DO PROBLEMA (3.1).....	23
3.5.1 CÁLCULOS AUXILIARES PARA DETERMINAR A MATRIZ P.....	23
3.5.2 CÁLCULO DA COLUNA J DA MATRIZ P.....	25

3.5.3 PRELIMINARES PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE QUADRADOS MÍNIMOS.....	27
3.6 RESOLUÇÃO DO PROBLEMA $\min_{v \in \mathbb{R}^n} \ Pv - b\ $	34
3.6.1 P É UMA MATRIZ COM 2d+1 DIAGONAIS, COM $d > 0$...	35
3.6.2 P É UMA MATRIZ DIAGONAL.....	38
3.7 CÁLCULO DA APROXIMAÇÃO DA HESSIANA.....	38
4 PROVAS DE CONVERGÊNCIA.....	40
4.1 INTRODUÇÃO.....	40
4.2 DESCRIÇÃO GERAL DA FAMÍLIA DE MÉTODOS APRESENTADA POR MARTÍNEZ.....	43
4.3 PRINCIPAIS RESULTADOS DE CONVERGÊNCIA DA TEORIA DE MARTÍNEZ.....	44
4.4 CONVÊRGENCIA DO MÉTODO LOCAL.....	51
5 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS , CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	55
5.1 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS.....	55
5.2 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	73
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	76

RESUMO

Neste trabalho se propõe um método para resolver Problemas não-lineares, sem restrições ou com restrições canalizadas e sendo diferenciável a função objetivo . São utilizadas técnicas de globalização do tipo região de confiança sem o cálculo de derivadas de segunda ordem. Ao invés do cálculo de derivadas de segunda ordem, se utilizam técnicas secantes para o cálculo de aproximações das matrizes Hessianas, as quais têm uma estrutura prefixada, do tipo banda. Essas aproximações são simétricas e permitem uma grande economia de memória computacional, pois somente são armazenadas as diagonais superiores não nulas, a partir da diagonal principal.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A resolução de Sistemas algébricos não-lineares de grande porte e de problemas de Programação não-linear com um grande número de variáveis constitui um importante tópico de pesquisa.

Os Sistemas de equações não-lineares surgem em muitos problemas da área tecnológica como, por exemplo, no fluxo de carga em redes de transmissão de energia elétrica, em simulações numéricas de reservatórios petrolíferos e em problemas de mecânica dos fluidos.

Os problemas de Programação não-linear também surgem na área tecnológica, como na simulação de problemas acústicos, nos problemas de aerodinâmica e nos problemas de fusão em reatores nucleares. Segundo T.Steihaug [36], problemas sem restrições ocorrem, por exemplo, em projetos estruturais que utilizam métodos de elementos finitos para a resolução de equações diferenciais não-lineares.

Em Programação não-linear a resolução de problemas com restrições é ao mesmo tempo uma tarefa difícil e um desafio interessante. Os problemas deste tipo mais frequentemente considerados surgem da discretização de problemas que aparecem naturalmente em espaços de dimensão infinita, como os de Cálculo Variacional e os de Controle Ótimo.

Os métodos do tipo "Região de Confiança" (Trust Region Methods) têm se firmado como uma poderosa ferramenta teórica e prática para tratar de problemas de Otimização com uma função objetivo qualquer, que não apresente propriedades especiais a serem exploradas([4,5,10,17,25,31,33,34,36,37]).

Segundo Toint [37], o sucesso desses métodos pode ser atribuído à atraente combinação de um fundamento algorítmico bastante intuitivo, fortes propriedades de convergência e comprovada eficiência numérica.

Existe uma vasta teoria disponível que trata da convergência desses métodos, quando se tem problemas de Otimização Irrestrita([10,18,31,33,34,36,37]). A partir de 1988, essa teoria foi estendida por Conn, Gould e Toint [4], para o caso em que existem restrições com variáveis independentes canalizadas.

Conn, Gould e Toint mostraram que praticamente qualquer problema de Otimização Não Linear pode ser resolvido eficientemente usando Técnicas de Lagrangeano Aumentado, desde que esteja disponível um bom método para resolver o problema:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize } f(x) & \textcircled{1} \\ \text{sujeito a } & \ell \leq x \leq u \end{array}$$

onde $\ell \leq x \leq u$ significa $\ell_i \leq x_i \leq u_i$, $i = 1, \dots, n$, e $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é não linear e continuamente diferenciável no conjunto viável.

Neste trabalho é apresentado um *Método de Região de Confiança para a resolução do Problema ①*, quando n é grande.

Como caso particular, estabelecendo-se suficientemente grande o limite superior e convenientemente pequeno o limite inferior de cada variável, obtém-se um *Método de Região de Confiança para Minimização Irrestrita*.

A característica especial do método aqui proposto é que são utilizadas falsas matrizes Hessianas do tipo banda. A utilização de uma estrutura prefixada para as aproximações das Hessianas permite uma grande economia de memória computacional, tornando o método adequado para problemas de grande porte.

São armazenados somente os elementos da diagonal principal e das diagonais superiores não nulas, sendo cada diagonal armazenada como uma linha, de forma que são utilizadas matrizes $(1 \times n)$ ou $(2 \times n)$ ou $(3 \times n)$, etc., dependendo do número de diagonais não nulas utilizado.

No processo de minimização da função f , na iteração k , tendo sido calculada a aproximação da solução \mathbf{x}_k , se determina o passo \mathbf{s}_k (que permite calcular \mathbf{x}_{k+1} pela fórmula $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$) por um algoritmo de região de confiança proposto por Friedlander-Martínez-Santos [17].

No capítulo 2 é apresentado o algoritmo de região de confiança com falsas Hessianas de banda para resolver o problema ①.

No capítulo 3 se mostra como são determinadas as aproximações Hessianas utilizadas no método do capítulo 2.

No capítulo 4 são apresentadas as provas de convergência.

No capítulo 5 são apresentados os experimentos numéricos, conclusões e recomendações.

CAPÍTULO 2

MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES NÃO-LINEARES COM RESTRIÇÕES DE CANALIZAÇÃO

2.1 UMA DESCRIÇÃO DE MÉTODOS DE REGIÃO DE CONFIANÇA E O MÉTODO DE FRIEDLANDER-MARTÍNEZ- -SANTOS

Quando se trata de minimização de funções, são chamados de Métodos Locais aqueles métodos que convergem se a aproximação inicial estiver suficientemente próxima de um ponto estacionário da função f .

Um exemplo de um método tipicamente local é o Método de Newton para minimização irrestrita de um função $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, que é dado por:

$$H(x_k) s_k = - \nabla f(x_k).$$

$$x_{k+1} = x_k + s_k,$$

onde

$$H(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x) \end{bmatrix} \quad \text{é a matriz Hessiana de } f \text{ no}$$

ponto x , e

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)^T \text{ o vetor gradiente de } f \text{ em } x..$$

Frequentemente os métodos locais são de fato muito eficientes, seja porque bons pontos iniciais são conhecidos, ou porque as regiões de convergência são sempre muito maiores do que é previsto pela teoria local. Porém, existem muitos problemas difíceis, onde os métodos puramente locais falham.

Para contornar essa limitação dos métodos locais são utilizadas estratégias para induzir o método a convergir independentemente da aproximação inicial. Os procedimentos mais utilizados para induzir a convergência são as técnicas de busca unidimensional e as estratégias baseadas em regiões de confiança.

Nesses dois procedimentos o método é induzido a convergir pela escolha da direção e do tamanho do passo que produzam um efetivo decréscimo da função objetivo f em cada iteração.

Quando se utiliza estratégia de busca unidimensional se determina inicialmente uma direção de descida d a partir de x_k , (d tal que $\nabla f(x_k)d < 0$) e depois se calcula, de forma exata ou aproximada, o tamanho do passo $\lambda_k > 0$ tal que $f(x_k + \lambda_k d) < f(x_k)$.

Como as aproximações das Hessianas usadas neste trabalho não são necessariamente definidas positivas, a técnica de busca unidimensional não é adequada devido à dificuldade em se determinar direções de descida. Nos métodos de busca unidimensional a matriz Hessiana B_k ou uma aproximação dela é definida positiva, e então se tem $v^T B_k v > 0$, para todo vetor $v \in \mathbb{R}^n$, v não nulo. Então, uma direção de descida d é dada pela solução do sistema linear $B_k d = -\nabla f(x_k)$.

Quando se utiliza estratégia de região de confiança, é feita uma estimativa inicial para o comprimento do passo; essa estimativa é chamada de raio de confiança e será denotada por Δ_k ; depois se determina na bola fechada de raio Δ_k , em torno de x_k , uma direção que produza um decréscimo "suficiente" no valor da função objetivo f .

Em linhas gerais, os métodos de região de confiança se comportam da forma descrita abaixo.

A partir da aproximação da solução x_k , para se obter x_{k+1} a função objetivo é aproximada nas vizinhanças de x_k por uma função quadrática Ψ_k ,

$$\Psi_k(s) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s,$$

sendo $s \in \mathbb{R}^n$ e B_k a matriz Hessiana de f no ponto x_k ou uma aproximação dela.

Então é escolhido um raio de confiança Δ_k e determinado um passo s_k , através da minimização exata ou aproximada de $\Psi_k(s)$ na vizinhança de raio Δ_k , chamada de região de confiança.

Obtido o passo s_k , se verifica se $(x_k + s_k)$ está na intersecção do conjunto viável com a região de confiança e se calcula $f(x_k + s_k)$ para verificar se houve um decrescimento satisfatório da função f . Em geral, é verificado se está satisfeita a Condição de Decrescimento de Armijo (ver [20]).

Caso isto ocorra, então $x_{k+1} = x_k + s_k$. Se não houve decrescimento satisfatório de f , então o raio de confiança é reduzido (a forma de reduzir o raio de confiança é definida em cada algoritmo), o passo s_k é recalculado, e se avalia novamente se houve o decrescimento requerido de f .

Os métodos que utilizam algum tipo de estratégia para a obtenção de convergência independente do ponto inicial são chamados de Métodos Globais ou Métodos Globalmente Convergentes.

Friedlander et al. [17] propuseram um método de região de confiança para resolver o problema ①; nesse método estão definidas as estratégias de busca e de comprimento de passo, e deve então ser definido como escolher a matriz B_k para o modelo quadrático.

Como é usual nos métodos de região de confiança mais recentes, nesse método a minimização do modelo quadrático é apenas aproximada; mas, essa falta de precisão não afeta a convergência global do algoritmo.

A característica peculiar deste método é que para a minimização aproximada de Ψ_k se utiliza uma função quadrática convexa auxiliar Q_k .

2.2 APROXIMAÇÕES SECANTES E APROXIMAÇÕES DE BANDA PARA AS HESSIANAS

Na resolução de problemas de Programação não-linear, quando não é possível ou quando não é econômico computacionalmente calcular as matrizes Hessianas, se procura determinar aproximações destas matrizes.

A procura de aproximações matriciais eficientes se originou na resolução de Sistemas de Equações Não Lineares, nos casos em que não era adequado ou possível calcular a

Matriz Jacobiana. Posteriormente esse trabalho foi estendido para o cálculo de Aproximações das Hessianas nos problemas de Otimização ([1],[7],[8],[9],[10],[16],[20],[23]).

Dessa forma se originaram os chamados Métodos Quase Newton. Dentre estes, a classe de métodos mais conhecida e bem sucedida é a dos Métodos Secantes.

Nesses métodos, na iteração $k+1$, a matriz B_{k+1} que aproxima a Hessiana é escolhida de modo a satisfazer a Equação Secante:

$$B_{k+1} s_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k). \quad (2.1)$$

$$\text{com } s_k = x_{k+1} - x_k.$$

Se $n > 1$, existem muitas matrizes satisfazendo a equação (2.1), e é necessário impor alguma outra condição para se obter B_{k+1} (ver[10], cap. 8 e 9).

Nas últimas décadas muito se desenvolveu sobre teoria e prática dos Métodos Secantes. Do ponto de vista teórico, se buscam métodos que sejam superlinearmente convergentes, onde a sequência $\{x_k\}$ é gerada de forma que convirja para um ponto x_* e satisfaça:

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = 0.$$

Recentemente, foram desenvolvidas teorias mais gerais que englobam os Métodos Secantes. A mais ampla delas é a de Martínez [24], que envolve uma diversidade de métodos conhecidos.

Nos métodos de minimização de funções que calculam aproximações das Hessianas, se dá o nome de Atualização da

Hessiana quando a aproximação na iteração $k+1$ é obtida a partir da aproximação na iteração k ; ou seja, quando na iteração $k+1$ não se despreza a aproximação da Hessiana na iteração anterior.

Nos problemas de grande porte não é adequado utilizar de forma convencional as matrizes Hessianas ou aproximações destas. Se n é grande, o espaço de armazenamento e o número de operações envolvendo os elementos dessas matrizes podem ter um custo computacional proibitivo.

Para a obtenção de um método para resolver o Problema ① que seja adequado para problemas com um número grande de variáveis, se propõe aqui uma conjugação do Método de Martínez-Friedlander-Santos com uma estratégia de atualização das Hessianas que exige pouca memória computacional.

Propõe-se que as atualizações das Hessianas tenham um número prefixado de diagonais não nulas. Matrizes desse tipo são chamadas de matrizes de banda. As consideradas neste trabalho são também simétricas, e serão denotadas por B .

Essas atualizações são de variação mínima, isto é, B_{k+1} deve estar o mais próximo possível de B_k na métrica induzida pela norma de Frobenius.¹

B_{k+1} não satisfaz exatamente a equação secante (2.1), mas minimiza $\|Bs_k - y\|_2$, onde $y = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$ e $B \in S$, sendo S

¹ A norma de Frobenius de $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é dada por $\|B\|_F = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n b_{ij}^2 \right)^{1/2}$.

o subespaço das matrizes simétricas de banda, com o número de diagonais não nulas prefixado.

A dedução das atualizações das Hessianas consideradas neste trabalho será o assunto do próximo capítulo.

2.3 MÉTODO DE REGIÃO DE CONFIANÇA UTILIZANDO FALSAS HESSIANAS DE BANDA.

É apresentado abaixo, o *Método de Região de Confiança com Falsas Hessianas de Banda*.

Seja S o subespaço das matrizes simétricas de banda com $(2d+1)$ diagonais não nulas, onde $d \in \mathbb{N}$.

Seja $B \in S$; sejam $\lambda_1(B) \leq \lambda_2(B) \dots \leq \lambda_n(B)$ os autovalores de B .

Sejam $\|\cdot\|_{\#}$ uma norma arbitrária em \mathbb{R}^n ou a norma que esta induz em $\mathbb{R}^{n \times n}$.²

Sejam $\sigma_1, \sigma_2, \alpha, \Delta_{\min}, \theta$ tais que

$$0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1, \alpha \in (0,1), \Delta_{\min} > 0, \theta \in (0,1].$$

No início do algoritmo de região de confiança tem-se um ponto inicial x_0 , uma aproximação Hessiana inicial $B_0 \in S$, uma matriz inversível $D_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (a matriz scaling), e um raio

² Se $\|\cdot\|_{\#}$ é uma norma em \mathbb{R}^n , a norma induzida em $\mathbb{R}^{n \times n}$ é dada por:
 $\|A\|_{\#} = \sup\{\|Av\|_{\#}, v \in \mathbb{R}^n, \|v\| = 1\}.$

inicial $\Delta^0 \geq \Delta_{\min}$. Para $k = 0, 1, 2, \dots$, dados o ponto x_k , a matriz $B_k \in S$, a matriz não singular D_k e $\Delta^k \geq \Delta_{\min}$, se obtém x_{k+1} , Δ_k e B_{k+1} pelo seguinte algoritmo:

ALGORITMO 2.1

Passo 1: (Estabeleça o raio inicial de confiança e determine um limitante superior para $\lambda_n(B_k)$).

Faça $\Delta \leftarrow \Delta^k$.

Calcule $M_k > 0$ tal que

$$\lambda_n(B_k) \leq M_k. \quad (2.2)$$

Passo 2: (Resolva o subproblema "fácil")

$$\left. \begin{array}{l} \text{Determine a solução global, } z_k^0(\Delta) \text{ de} \\ \text{Minimize } Q_k(z) = \frac{1}{2} M_k \|z\|_2^2 + \nabla f(x_k)^T z \\ \text{s. a} \quad \quad \quad \left. \begin{array}{l} l \leq x_k + z \leq u \\ \|D_k z\|_{\#} \leq \Delta \end{array} \right\} \end{array} \right\} \quad (2.3)$$

Se $Q_k(z_k^0(\Delta)) = 0$, pare.

Passo 3: (Calcule o passo experimental)

Calcule $\bar{z}_k(\Delta)$ tal que

$$\left. \begin{array}{l} \Psi_k(\bar{z}_k(\Delta)) \leq \theta Q_k(z_k^0(\Delta)) \\ l \leq x_k + \bar{z}_k(\Delta) \leq u \\ \|D_k(\bar{z}_k(\Delta))\|_{\#} \leq \Delta \end{array} \right\} \quad (2.4)$$

$$\text{onde } \Psi_k(z) = \frac{1}{2} z^T B_k z + \nabla f(x_k)^T z \quad (2.5)$$

para todo $z \in \mathbb{R}^n$.

Passo 4: (Teste do decrescimento de f)

Se

$$f(x_k + \bar{z}_k(\Delta)) \leq f(x_k) + \alpha \Psi_k(\bar{z}_k(\Delta)) \quad (2.6)$$

então defina

$$z_k = \bar{z}_k(\Delta), \quad x_{k+1} = x_k + z_k, \quad \Delta_k = \Delta,$$

determine B_{k+1} e retorne ;

B_{k+1} é a solução do seguinte problema

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } \|B - B_k\|_F^2 \\ &\text{s. a} \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} &\langle B \text{ é minimizador de } \|Bz_k - y\|_2^2 \\ &\text{s.a } B \in S \rangle \end{aligned}$$

Senão,

substitua Δ por Δ_{new} , onde

$$\Delta_{\text{new}} \in [\sigma_1 \|D_k \bar{z}_k(\Delta)\|_{\#}, \sigma_2(\Delta)] \quad (2.8)$$

e repita o passo 2.

2.4 PRINCIPAIS RESULTADOS DE CONVERGÊNCIA DO MÉTODO DE FRIEDLANDER-MARTÍNEZ-SANTOS

Os passos do algoritmo de Friedlander-Martínez-Santos são os do Algoritmo 2.1, com exceção da resolução do subproblema (2.7) utilizado para o cálculo da matriz B_{k+1} . No trabalho desses autores a forma de calcular B_k não está estabelecida inicialmente, e deve ser escolhida de forma conveniente, podendo ser a Hessiana verdadeira ou uma aproximação dela.

LEMA 2.2

Se o Algoritmo 2.1 pára no Passo 2 (com $Q_k(z_k^Q(\Delta))=0$)então x_k é um ponto de Kuhn-Tucker do problema ①.

Prova: Ver [17].■

TEOREMA 2.3

O Algoritmo 2.1 está bem definido.Ou seja, se o processo não pára no Passo 2 (com $Q_k(z_k^Q(\Delta))=0$)então x_{k+1} pode ser calculado repetindo-se os Passos 2-4 um número finito de vezes.

Prova: Ver [17].■

O próximo teorema prova a convergência global do Algoritmo 2.1.

TEOREMA 2.4

Suponha que $\{x_k\}$ seja uma sequência infinita gerada pelo Algoritmo 2.1, K seja um conjunto infinito de índices tais que

$\lim_{k \in K} x_k = x^*$ e $M_k, \|D_k\|_{\#}, \|D_k^{-1}\|_{\#}$ e $|\lambda_1(B_k)|$ são limitados se $k \in K$.

Então x^* é um ponto estacionário (Kuhn-Tucker) do problema ①.

Prova: Ver [17].■

CAPÍTULO 3

APROXIMAÇÕES DE BANDA PARA AS HESSIANAS

3.1 INTRODUÇÃO

Dennis e Schnabel ([9] e [10]) desenvolveram uma técnica conhecida como Técnica de Projeções Iteradas, que permite obter aproximações para as Hessianas nos problemas de minimização, ou aproximações para os Jacobianos nos problemas de resolução de sistemas de equações não lineares.

Essa técnica permite que se obtenham aproximações matriciais com propriedades adicionais desejadas. Por exemplo, permite a obtenção de atualizações simétricas para os Jacobianos, ou atualizações para as Hessianas com um determinado modelo de esparsidade.

A idéia básica do trabalho desses autores, para o caso de aproximações de Hessianas, é descrita abaixo.

Seja V uma variedade afim de matrizes que têm as propriedades requeridas para as atualizações de Hessianas.

Seja $Q(y,s)$ o conjunto de matrizes que satisfazem a equação secante, isto é,

$$Q(y,s) = \{M \in \mathbb{R}^{n \times n} / Ms = y\},$$

onde $s = x_{k+1} - x_k$ e $y = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$.

Seja B uma matriz em V . B é projetada em $Q(y,s)$, a matriz resultante é projetada novamente em V , e se prossegue dessa mesma forma.

Se $Q(y,s) \cap V \neq \emptyset$, é provado [9] que com esse processo de projeções iteradas se obtém um limite B_+ , que é a matriz de $Q(y,s) \cap V$ mais próxima da matriz B , considerando a métrica induzida pela norma de Frobenius. Portanto, se $Q(y,s) \cap V \neq \emptyset$, B_+ é a solução de

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & \|B - M\|_F \\ \text{s.a} & M \in Q(y,s) \end{array}$$

No caso de $Q(y,s) \cap V = \emptyset$, é provado [9] que o limite B_+ obtido tem a seguinte propriedade: B_+ é a matriz do conjunto V que está mais próxima da matriz B , dentre as matrizes de V que minimizam a distância entre V e $Q(y,s)$, considerando a métrica induzida pela norma de Frobenius. Portanto, se $Q(y,s) \cap V = \emptyset$, B é a solução de

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & \|B - M\|_F \\ \text{s.a} & < M \text{ é minimizador de } \|M_s - y\|_2 \\ & \text{s.a } M \in S > \end{array}$$

Várias fórmulas de aproximações das Hessianas bem conhecidas, como as dos métodos DFP (Davidon-Fletcher-Powell) e BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno), podem ser obtidas com a técnica de projeções iteradas, com demonstrações novas e bem mais simples.

O mais importante, entretanto, é que essa técnica permite a obtenção de aproximações matriciais, mesmo quando é impossível satisfazer simultaneamente a equação secante e outras propriedades requeridas.

Por exemplo, se não é possível satisfazer simultaneamente a equação secante e um certo modelo de esparsidade, se obtém uma matriz com o formato desejado e que minimiza a distância entre a variedade V de matrizes com esse formato e o conjunto $Q(y,s)$ de matrizes que satisfazem a equação secante.

3.2 CONSIDERAÇÕES SOBRE MATRIZES DE BANDA E SEU ARMAZENAMENTO COMPUTACIONAL

DEFINIÇÃO 3.1

Sejam $d \in \mathbb{N}$, $n \in \mathbb{N}^*$, com $0 \leq d \leq n - 1$, e $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

A é uma matriz de banda com $(2d+1)$ diagonais, se $a_{ij} = 0$ quando $|i - j| > d$, isto é, se existem d diagonais não nulas de cada lado da diagonal principal.

Observe-se que:

se $d = 0$, A é uma matriz diagonal;

se $d = 1$, A é uma matriz tridiagonal;

se $d = 2$, A é uma matriz pentadiagonal.

Neste trabalho são utilizadas somente matrizes de banda simétricas, isto é, $a_{ij} = a_{ji}$, $\forall i, j \in \{1, \dots, n\}$.

Por exemplo, se $n = 8$ e $d = 2$, então:

$$A = \begin{bmatrix} 11 & 12 & 13 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 12 & 22 & 23 & 24 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 13 & 23 & 33 & 34 & 35 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 24 & 34 & 44 & 45 & 46 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 35 & 45 & 55 & 56 & 57 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 46 & 56 & 66 & 67 & 68 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 57 & 67 & 77 & 78 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 68 & 78 & 88 \end{bmatrix}$$

Nas matrizes de banda, se o número de diagonais é pequeno, à medida que n cresce o número de zeros torna-se muito grande; como a distribuição desses zeros na matriz é conhecida *a priori*, não é necessário armazená-los.

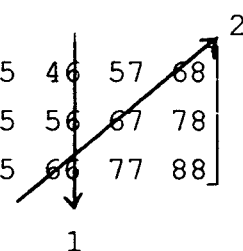
Como a matriz é simétrica basta armazenar a diagonal principal e as d diagonais superiores não nulas, formando uma matriz com $(d+1)$ linhas e n colunas.

Seja A a matriz de banda simétrica original, e BA a matriz obtida após o armazenamento das diagonais.

A última diagonal superior não nula de A (aquela mais afastada da diagonal principal) é colocada na primeira linha de BA , e se prossegue armazenando as diagonais não nulas de A como linhas de BA , na mesma ordem; deste modo, a primeira diagonal de A acima da diagonal principal constitui a linha d de BA , e a diagonal principal de A constitui a linha $(d+1)$ de BA .

Assim, a matriz A do exemplo anterior é armazenada da seguinte forma:

$$BA = \begin{bmatrix} * & * & 13 & 24 & 35 & 46 & 57 & 68 \\ * & 12 & 23 & 34 & 45 & 56 & 67 & 78 \\ 11 & 22 & 33 & 44 & 55 & 66 & 77 & 88 \end{bmatrix}$$



O símbolo * indica que não existem elementos de A a serem armazenados naquelas posições de BA.

As setas 1 e 2 indicam como estão dispostos em BA os elementos da linha 6 da matriz A.

Este novo formato da matriz requer que todas as operações e cálculos sejam adequadamente programados.

No que segue, toda referência a uma matriz de banda é relativa à matriz de banda $n \times n$. O formato compactado (como BA acima) é utilizado apenas na implementação computacional.

3.3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA PARA A OBTENÇÃO DA ATUALIZAÇÃO DA HESSIANA

Seja $S \in R^{n \times n}$ o subespaço das matrizes simétricas com $(2d+1)$ diagonais não nulas.

Seja B_k a aproximação da Hessiana na iteração k .

Na iteração $k+1$, obtido o passo s , calcula-se:

$$x_{k+1} = x_k + s \quad e$$

$$y = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k).$$

A aproximação B_{k+1} é obtida a partir de B_k da seguinte forma:

B_{k+1} é a solução do problema

$$\text{Minimizar } \|B - B_k\|_F^2 \quad (3.1)$$

$$\text{s.a } \begin{aligned} &< B \text{ é minimizador de } \|Bs - y\|_2^2 \\ &\text{s.a} \end{aligned}$$

$$B \in S >$$

No que segue, no decorrer deste capítulo, $\|\cdot\|$ significa $\|\cdot\|_2$.

3.4 RESULTADOS INTERMEDIÁRIOS

A solução do problema (3.1) é obtida utilizando os resultados apresentados por Dennis e Schnabel ([9] e [10]), baseados na Técnica de Projeções Iteradas.

A seguir são apresentados alguns desses resultados, considerando que S é um subespaço de matrizes simétricas com um modelo qualquer de esparsidade determinado.

Posteriormente, na aplicação desses resultados, S será definido como o subespaço das matrizes de banda simétricas, com o número de diagonais prefixado.

LEMA 3.1

Seja $T \in R^{n \times n}$ uma matriz simétrica cujos elementos são 0 ou 1.

Seja $S \subset R^{n \times n}$ o subespaço das matrizes com o mesmo modelo de esparsidade de T , ou seja,

$$S = \{M \in R^{n \times n} / m_{ij} = 0 \text{ se } t_{ij} = 0, \quad 1 \leq i, j \leq n\}.$$

Seja $\Gamma : R^{n \times n} \rightarrow R^{n \times n}$ o operador tal que

$$(\Gamma(M))_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } t_{ij} = 0 \\ m_{ij} & \text{se } t_{ij} = 1 \end{cases} \quad (3.2)$$

Então, para todo $M \in R^{n \times n}$, a única solução para o problema

$$\begin{aligned} \text{Min } \|M_+ - M\|_F \\ \text{s. a } M_+ \in S \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\text{é } M_+ = \frac{1}{2} \Gamma(M + M^T). \quad (3.4)$$

Prova: Ver Dennis e Schnabel [9]. ■

Observe-se que, por (3.3), M_+ é a projeção ortogonal de M em S . Ou seja, $M_+ = P_S(M)$, onde

$P_S : R^n \rightarrow R^n$ é o operador projeção ortogonal em S .

Portanto, por (3.4),

$$P_S(M) = \frac{1}{2} \Gamma(M + M^T). \quad (3.5)$$

EXEMPLO 3.2

Sejam $S \subset R^{5 \times 5}$ o subespaço das matrizes simétricas tridiagonais e $M \in R^{5 \times 5}$,

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 11 & 12 & 13 & 14 & 15 \\ 16 & 17 & 18 & 19 & 20 \\ 21 & 22 & 23 & 24 & 25 \end{bmatrix}.$$

A matriz 'molde' T é dada por $T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$

Portanto, pelo Lema 3.1,

$$P_S(M) = \frac{1}{2} \Gamma(M + M^T) = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 7 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 13 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 16 & 19 & 22 \\ 0 & 0 & 0 & 22 & 25 \end{bmatrix}.$$

TEOREMA 3.3

Sejam $Q(y, s) = \{M \in R^{n \times n} / Ms = y; s, y \in R^n, s \neq 0\}$, S um subespaço de $R^{n \times n}$ e P_S a projeção ortogonal em S .

Sejam e_j o vetor de R^n com 1 na j -ésima coordenada e 0 nas demais e

P a matriz cuja j -ésima coluna é dada por

$$\left(P_S \left[\frac{e_j s^T}{s^T s} \right] \right) s. \quad (3.6)$$

Seja v uma solução qualquer do problema

$$\min_{v \in R^n} \| Pv - (y - Bs) \|, \text{ onde } B \in S. \quad (3.7)$$

Então

$$B_+ = B + \frac{1}{s^T s} P_S(v s^T) \quad (3.8)$$

é a matriz em S mais próxima de B , dentre as matrizes de S que estão a uma distância mínima do conjunto $Q(y,s)$.

Se o mínimo é zero, então $B_+ \in Q(y,s)$.

Prova: Ver Dennis e Schnabel [9].■

3.5 RESOLUÇÃO FORMAL DO PROBLEMA (3.1)

O problema (3.1) é resolvido pela aplicação direta do Teorema 3.3 e do Lema 3.1, considerando:

$S \subset R^{n \times n}$: subespaço das matrizes de banda simétricas com m $(2d+1)$ diagonais.

s : passo que será adicionado a x_k para obter x_{k+1} .

$y = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$.

$B = B_k \in S$: aproximação da Hessiana na iteração k .

$B_{k+1} = B_+$, isto é, a aproximação B_{k+1} é obtida por (3.8).

Para o cálculo efetivo de B_{k+1} , é necessário que se calcule a matriz P , utilizando (3.6), e que, posteriormente se resolva o problema (3.7).

3.5.1 CÁLCULOS AUXILIARES PARA DETERMINAR A MATRIZ P

Seja $T \in S$, dada por

$$t_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } |i - j| \leq d \\ 0 & \text{se } |i - j| > d \end{cases}$$

T é uma matriz de banda, com 1's nas $(2d+1)$ diagonais.

Seja $s = (s^1, s^2, \dots, s^n)^T$. (3.9)

Seja s_i , $i = 1, \dots, n$, o vetor obtido a partir de s : a j -ésima coordenada de s_i , denotada por $s_{i,j}$ é dada por

$$s_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{se } t_{ij} = 0 \\ s^i & \text{se } t_{ij} = 1 \end{cases} \quad (3.10)$$

Portanto, s_i^T tem o mesmo modelo de esparsidade da linha i da matriz T.

Seja $n > 2d$. Os vetores s_i podem ser explicitados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} s_1^T &= (s^1, s^2, \dots, s^{d+1}, 0, \dots, 0). \\ s_2^T &= (s^1, s^2, \dots, s^{d+2}, 0, \dots, 0). \\ &\vdots \\ s_d^T &= (s^1, s^2, \dots, s^{2d}, 0, \dots, 0). \\ s_{d+1}^T &= (s^1, s^2, \dots, s^{2d+1}, 0, \dots, 0). \\ s_{d+2}^T &= (0, s^2, \dots, s^{2d+2}, 0, \dots, 0). \\ &\vdots \\ s_{n-d}^T &= (0, 0, \dots, s^{n-2d}, \dots, s^n). \\ s_{n-d+1}^T &= (0, 0, \dots, s^{n-2d+1}, \dots, s^n). \\ &\vdots \\ s_{n-1}^T &= (0, 0, \dots, 0, s^{n-d-1}, s^{n-d}, \dots, s^n). \\ s_n^T &= (0, 0, \dots, 0, s^{n-d}, s^{n-d+1}, \dots, s^n). \end{aligned}$$

Da definição de s_i , em (3.10), resulta que:

$$s_i^T s = s_i^T s_i. \quad (3.11)$$

3.5.2 CÁLCULO DA COLUNA J DA MATRIZ P

Por (3.5) e (3.6), e pela linearidade de P_s , se obtém que a coluna j de P é dada por:

$$\frac{1}{2s^T s} \Gamma([e_j s^T + s e_j^T]) s. \quad (3.12)$$

Mas,

$$e_j s^T + s e_j^T = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ s^1 & \dots & s^j & \dots & s^n \\ \vdots & \dots & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \dots & s^1 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & s^j & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & s^n & \dots & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

Portanto,

$$e_j s^T + s e_j^T = \begin{bmatrix} 0 & \dots & s^1 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ s^1 & \dots & 2s^j & \dots & s^n \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & s^n & \dots & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.14)$$

Por (3.2) e (3.10) resulta que a j -ésima linha da matriz

$\Gamma([e_j s^T + s e_j^T])$ é igual a:

$$s_j^T + [0 \dots 0 \ s^j \ 0 \dots 0]. \quad (3.15)$$

Por simetria, a j -ésima coluna dessa matriz é igual a:

$$s_j + [0 \dots s^j \ 0 \dots 0]^T. \quad (3.16)$$

Então,

$$\Gamma(e_j s^T + s e_j^T) = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ s_j^T & \rightarrow & \rightarrow & \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \dots & s_j & \dots & 0 \\ \vdots & & \downarrow & & \vdots \\ \vdots & & \downarrow & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

$$\text{Portanto, } \Gamma(e_j s^T + s e_j^T) = e_j s_j^T + s_j e_j^T. \quad (3.17)$$

Substituindo (3.17) em (3.12) se obtém que a coluna j de P é igual a

$$\frac{1}{2s^T s} \left([e_j s_j^T] s + [s_j e_j^T] s \right), \quad (3.18)$$

e, após a efetivação dos cálculos, se obtém, finalmente, que a coluna j de P é dada por:

$$\frac{1}{2s^T s} \left([s_j^T s_j] e_j + s_j^j s_j \right). \quad (3.19)$$

EXEMPLO 3.4

Se $n = 8$, $d = 2$ e $s = (s^1, \dots, s^8)$, então P é dada por:

$$\frac{1}{2s^T s} \begin{bmatrix} d_1 & s^1 s^2 & s^1 s^3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s^2 s^1 & d_2 & s^2 s^3 & s^2 s^4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s^3 s^1 & s^3 s^2 & d_3 & s^3 s^4 & s^3 s^5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s^4 s^2 & s^4 s^3 & d_4 & s^4 s^5 & s^4 s^6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s^5 s^3 & s^5 s^4 & d_5 & s^5 s^6 & s^5 s^7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s^6 s^4 & s^6 s^5 & d_6 & s^6 s^7 & s^6 s^8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s^7 s^5 & s^7 s^6 & d_7 & s^7 s^8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s^8 s^6 & s^8 s^7 & d_8 \end{bmatrix}$$

sendo

$$d_j = \sum_{k=1}^{j+d} (s^k)^2 + (s^j)^2 \quad \text{se } j = 1, 2.$$

$$d_j = \sum_{k=j-d}^{j+d} (s^k)^2 + (s^j)^2 \quad \text{se } j = 3, 4, 5, 6.$$

$$d_j = \sum_{k=j-d}^n (s^k)^2 + (s^j)^2 \quad \text{se } j = 7, 8.$$

Para a obtenção da aproximação da hessiana B_{k+1} o próximo passo é resolver o problema de quadrados mínimos (3.7).

3.5.3 PRELIMINARES PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE QUADRADOS MÍNIMOS.

$$\text{Seja } b = y - Bs. \quad (3.20)$$

Utilizando (3.20), a expressão (3.7) pode ser reescrita por

$$\begin{aligned} \text{Min } & \| Pv - b \| \\ & v \in R^n \end{aligned} \quad (3.21)$$

Na resolução de (3.21) devem ser consideradas duas possibilidades:

i) P é inversível.

Neste caso existe uma única solução v , que é a solução do sistema linear $Pv = b$.

ii) P não é inversível; isto é, posto $(P) < n$.

Nestas condições, o problema (3.21) tem infinitas soluções; dentre elas existe uma única solução v^* , chamada de solução de norma mínima, que satisfaz a relação

$$\|v^*\| \leq \|v\|,$$

para todo v que satisfaz (3.21).

Para determinar v^* geralmente são utilizadas técnicas especiais como, por exemplo, a Decomposição em Valores Singulares. Como n é grande, é proibitivo o esforço computacional para determinar, em cada passo, a Decomposição em Valores Singulares de P .

Pela análise da matriz P foi observado que ela satisfaz propriedades muito especiais, e que é possível determinar a solução de norma mínima pela utilização adequada dessas propriedades.

Essas propriedades de P são apresentadas a seguir.

PROPRIEDADE P1

Pela própria construção, $P \in S$. Isto é P é simétrica, de banda, com $(2d+1)$ diagonais. ■

PROPRIEDADE P2

Seja $1 \leq j \leq n$. Se $s^j = 0$, então todos os elementos da coluna j de P são nulos, exceto possivelmente o elemento da diagonal principal.

Como P é simétrica, o mesmo ocorre com a linha j .

Prova:

Reescrevendo (3.19), a coluna j de P é dada por

$$\frac{1}{2\|s\|^2} (s^j s_j + (s_j^T s_j) e_j). \quad (3.22)$$

Então, o elemento p_{kj} de P é dado por

$$p_{kj} = \frac{1}{2\|s\|^2} (s^j s_{j,k} + (s_j^T s_j) e_{j,k}). \quad (3.23)$$

Se $k \neq j$, pela definição do vetor e_j se tem $e_{j,k} = 0$.

Portanto, se $k \neq j$, como $s^j = 0$, se tem $p_{kj} = 0$. ■

PROPRIEDADE P3

Os elementos da diagonal principal de P são sempre positivos ou nulos.

Prova:

$$\text{Por (3.23), } p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} (s^j s_{j,j} + (s_j^T s_j) e_{j,j}).$$

Como $s_{j,j} = s^j$ e $e_j(j) = 1$,

$$p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} ((s^j)^2 + s_j^T s_j).$$

$$\text{Portanto, } p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} ((s^j)^2 + \|s_j\|^2) \geq 0. \quad (3.24) \quad \blacksquare$$

Observe-se que:

$$p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} \left(\sum_{k=1}^{j+d} (s^k)^2 + (s^j)^2 \right), \quad j = 1, \dots, d+1. \quad (3.25)$$

$$p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} \left(\sum_{k=j-d}^{j+d} (s^k)^2 + (s^j)^2 \right), \quad j = d+2, \dots, n-d. \quad (3.26)$$

$$p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} \left(\sum_{k=j-d}^n (s^k)^2 + (s^j)^2 \right), \quad j = n-d+1, \dots, n. \quad (3.27)$$

PROPRIEDADE P4

Se o elemento p_{jj} da diagonal principal de P é nulo, então todos os elementos da coluna (linha) j são nulos.

Prova:

Sejam $j / 1 \leq j \leq n$ e $p_{jj} = 0$.

Por (3.24), $p_{jj} = 0 \Leftrightarrow s^j = 0$ e $\|s_j\| = 0$.

Pela Propriedade P2, se $s^j = 0$, então $p_{kj} = 0$, $\forall k \neq j$.

Portanto, como $p_{jj} = 0$, a coluna j é nula.

Pela simetria da matriz P se segue que a linha j é nula. ■

PROPRIEDADE P5

Seja $j / 1 \leq j \leq d+1$. Se $p_{jj} = 0$, então:

(a) P tem todas as colunas (linhas) nulas até a coluna (linha) j .

(b) As colunas (linhas) $j+1, \dots, j+d$ são nulas, exceto possivelmente sobre a diagonal principal.

Prova:

Seja $j / 1 \leq j \leq d+1$.

Por (3.25), $p_{jj} = 0 \Leftrightarrow s^k = 0$, $\forall k = 1, \dots, j+d$.

(a) $\forall i \leq j \Rightarrow i+d \leq j+d$.

Então, $s^1 = s^2 = \dots = s^{i+d} = 0$, e, por (3.25), $p_{ii} = 0$

Pela Propriedade P4, se conclui que a coluna (linha) i é nula.

(b) Como $s^k = 0$, $k = j+1, \dots, j+d$, pela Propriedade P2, se segue que essas colunas k (linhas k) são nulas, com possível exceção para os elementos diagonais dessas colunas (linhas). ■

Observe-se que :

Pelo item (a) existe um "bloco nulo" ($j \times j$), até $p_{jj} = 0$.

O item (b) assegura a existência de um "bloco diagonal" ($d \times d$) posterior a $p_{jj} = 0$.

Isto é ilustrado a seguir.

$$\begin{bmatrix}
 0 & \dots & 0 & | & 0 & 0 & \dots & 0 & | & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 \vdots & \ddots & \vdots & | & \vdots & 0 & \ddots & 0 & | & 0 & 0 & \ddots & \vdots \\
 0 & \dots & 0 & | & 0 & 0 & \dots & 0 & | & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 - & - & - & | & - & - & - & - & | & - & - & - & - \\
 0 & 0 & 0 & | & p_{j+1,j+1} & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & | & 0 & \ddots & 0 & 0 & | & 0 & 0 & & 0 \\
 \vdots & \ddots & \vdots & | & 0 & 0 & \ddots & 0 & | & \vdots & & \ddots & \vdots \\
 0 & \dots & 0 & | & 0 & 0 & 0 & p_{j+d,j+d} & | & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 - & - & - & | & - & - & - & - & | & - & - & - & - \\
 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & \dots & 0 & | & B & L & O & C & O \\
 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & | & & & & & \\
 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & | & & D & E & & \\
 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & | & & & & & \\
 \vdots & \ddots & \vdots & | & \vdots & & \ddots & \vdots & | & B & A & N & D & A \\
 0 & \dots & 0 & | & 0 & 0 & \dots & 0 & | & & & & &
 \end{bmatrix}$$

OBSERVAÇÃO: O "bloco nulo" citado acima é o bloco nulo no "canto superior esquerdo" da matriz. O "bloco diagonal" mencionado é o bloco que contém os elementos $p_{j+1,j+1}$ e $p_{j+d,j+d}$.

Propriedade P6

Seja $j / d+2 \leq j \leq n-d$.

Se $p_{jj} = 0$, então as d colunas à esquerda e as d colunas à direita da coluna j são nulas, exceto possivelmente sobre a diagonal principal.

Prova:

Por (3.26),

$$p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} \left(\sum_{k=j-d}^{j+d} (s^k)^2 + (s^j)^2 \right).$$

$$p_{jj} = 0 \Leftrightarrow s^k = 0, \quad k = j-d, \dots, j+d.$$

Pela Propriedade P2, para esses valores de k , as colunas k são nulas, com possível exceção para o elemento diagonal. ■

Observe-se que:

A Propriedade P6 mostra que existe um "bloco diagonal" $(d \times d)$ antecedendo o elemento $p_{jj} = 0$, e outro "bloco diagonal" $(d \times d)$ subsequente a $p_{jj} = 0$.

PROPRIEDADE P7

Seja $j / n-d+1 \leq j \leq n$.

Se $p_{jj} = 0$, então:

(a) as colunas $j-d, \dots, j-1$ são nulas, exceto possivelmente sobre a diagonal principal.

(b) a partir da coluna j , todas as colunas de P são nulas.

Prova:

Seja $j / n-d+1 \leq j \leq n$.

Por (3.27),

$$p_{jj} = \frac{1}{2\|s\|^2} \left(\sum_{k=j-d}^n (s^k)^2 + (s^j)^2 \right).$$

$$p_{jj} = 0 \Leftrightarrow s^k = 0, k = j-d, \dots, n.$$

(a) como $s^k = 0, k = j-d, \dots, n$, então, pela Propriedade P2, se conclui que a partir da coluna $j-d$ todas as colunas têm apenas elementos nulos fora da diagonal principal. Em particular, isto ocorre com as colunas $j-d, \dots, j-1$.

(b) Sejam j e $r / n-d+1 \leq j \leq r \leq n$.

Como $r \geq j$, então $r-d \geq j-d$ e, por (a),

$s^k = 0, k = r-d, \dots, n$; em particular, $s^r = 0$.

Portanto, $p_{rr} = 0$, e, pela Propriedade P4, se obtém que a coluna r é nula.

Como isto é válido para $j \leq r \leq n$, se conclui que a partir de j todas as colunas de P são nulas. ■

Observe que:

O item (a) assegura a existência de um "bloco diagonal" ($d \times d$) anterior a $p_{jj} = 0$. O item (b) assegura a existência de um "bloco nulo" ($j \times j$) até o canto inferior direito de P .

PROPRIEDADE P8

Se $s \neq \vec{0}$ e $0 \leq d \leq n-2$, então P é uma matriz semidefinida positiva.

Se $s \neq \bar{0}$ e $d = n-1$, então P é uma matriz definida positiva.

Prova: ver [9]. ■

A seguir, utilizando as propriedades de P vistas acima, é resolvido o problema de norma mínima (3.21).

3.6 RESOLUÇÃO DO PROBLEMA $\min_{v \in R^n} ||Pv - b||$

3.6.1 P É UMA MATRIZ COM $2d+1$ DIAGONAIS, com $d > 0$

Existem duas possibilidades:

(i) Todos os elementos da diagonal principal de P são não nulos.

Nesse caso, a matriz D da demonstração da parte a) da Propriedade P8 tem todos os elementos positivos e, portanto, P é definida positiva.

Então, utilizando a fatoração de Cholesky resulta que

$$P = LL^T, \quad L: \text{matriz triangular inferior.}$$

De fato, L é uma matriz com uma diagonal principal e d diagonais inferiores [21].

Portanto, L é uma matriz triangular inferior com $(d+1)$ diagonais; isto significa que L tem o formato adequado para o armazenamento computacional proposto.

A solução v^* do problema (3.21) é dada pela única solução do sistema

$$LL^T v = b.$$

Para determinar v^* são resolvidos dois sistemas triangulares com $(d+1)$ diagonais:

$$L c = b \quad \text{e} \quad L^T v = c.$$

É importante notar que, como P é definida positiva, a decomposição de P não requer mudanças de linhas.

(ii) Existem elementos nulos na diagonal principal de P .

Seja j ($1 \leq j \leq n$) tal que $p_{jj} = 0$.

Pelas propriedades $P4$ e $P5$, nas "adjacências" de p_{jj} existe pelo menos um "bloco diagonal" ($d \times d$).

Devido ao formato de banda de P , em cada linha j existem no máximo d elementos não nulos de cada lado da diagonal principal.

Com essa estrutura matricial, se $p_{jj} = 0$, é possível decompor a matriz P em blocos independentes após a eliminação da linha j e da coluna j .

Após a decomposição em blocos, cada uma das matrizes "utilizáveis" obtidas é de banda e definida positiva, e será denotada por \bar{P} .

Também do vetor b são retiradas as coordenadas b_j para os j tais que $p_{jj} = 0$. Isso separa o vetor b em blocos correspondentes aos blocos matriciais P . Cada bloco de b , correspondente ao bloco \bar{P} , será denotado por \bar{b} .

Procedendo de modo análogo com o vetor de variáveis v , são obtidos os blocos correspondentes \bar{v} .

Dessa forma, são obtidos os sistemas lineares:

$\bar{P}v = \bar{b}$, com \bar{P} definida positiva.

Esses sistemas podem então ser resolvidos da mesma forma apresentada no item (i).

As soluções desses sistemas fornecem as coordenadas v_j^* da solução de norma mínima v^* , para todos os j tais que $p_{jj} \neq 0$.

Se $p_{jj} = 0$, então $r_j = b_j - Pv_j = b_j$, $\forall v_j \in R$. Para que v^* tenha norma mínima se faz $v_j^* = 0$.

EXEMPLO 3.5

Seja $n = 11$, $d = 2$ e $s = (0, 0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 0, 0, 0)$

A matriz pentadiagonal P é dada por:

$$\frac{1}{60} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 15 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 34 & 6 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 6 & 39 & 12 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 12 & 45 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Neste caso, a solução de norma mínima do problema é:

$$v_1^* = v_2^* = v_{11}^* = 0;$$

$v_3^*, v_4^*, \dots, v_{10}^*$, são obtidos pela solução do sistema

$P v = b$, onde $v^T = (v_3, \dots, v_{10})$ e $b^T = (b_3, \dots, b_{10})$

e P é obtida a partir de P , pela supressão das linhas e colunas 1, 2 e 11.

EXEMPLO 3.6

Seja $n = 11$, $d = 1$ e $s = (2, 1, 0, 0, 0, 2, 3, 0, 0, 0, 1)$.

A matriz tridiagonal P é dada por:

$$\frac{1}{38} \begin{bmatrix} 9 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 17 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 22 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Neste caso, P é decomposta em 3 blocos diagonais independentes gerando os seguintes sistemas:

$$\frac{1}{38} \begin{bmatrix} 9 & 2 & 0 \\ 2 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix};$$

$$\frac{1}{38} \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 17 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 22 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \end{bmatrix} \quad e$$

$$\frac{1}{38} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{10} \\ v_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{10} \\ b_{11} \end{bmatrix}.$$

Resolvendo os sistemas acima, e tomando $v_4^* = v_9^* = 0$, se obtém a solução de norma mínima v^* .

3.6.2 P É UMA MATRIZ DIAGONAL

Neste caso, a solução de norma mínima v^* é obtida diretamente:

se $p_{jj} = 0$, então $v_j^* = 0$.

se $p_{jj} \neq 0$, então $v_j^* = \frac{b_j}{p_{jj}}$.

3.7 CÁLCULO DA APROXIMAÇÃO DA HESSIANA

Pelo Teorema 3.3 se tem

$$B_{k+1} = B_k + P_s \frac{v^* s^T}{s^T s} \quad e,$$

aplicando o lema 3.1, se obtém:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{1}{2s^T s} \Gamma(v^* s^T + s(v^*)^T). \quad (3.37)$$

Seja $\bar{V} = v^* s^T + s(v^*)^T$.

Então \bar{V} é dada por:

$$\begin{bmatrix} 2v_1^* s^1 & v_1^* s^2 + v_2^* s^1 & \cdots & v_1^* s^n + v_n^* s^1 \\ v_2^* s^1 + v_1^* s^2 & 2v_2^* s^2 & \cdots & v_2^* s^n + v_n^* s^2 \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ v_n^* s^1 + v_1^* s^n & v_n^* s^2 + v_2^* s^n & \cdots & 2v_n^* s^n \end{bmatrix}$$

$$\text{Seja } \bar{\bar{V}} = \frac{1}{2s^T s} \Gamma(\bar{V}).$$

$$\text{Então, } \bar{\bar{v}}_{ij} = \begin{cases} \bar{v}_{ij} & \text{se } |i - j| \leq d \\ 0 & \text{se } |i - j| > d \end{cases}.$$

Utilizando a expressão (3.37) se obtém a atualização da matriz Hessiana

$$B_{k+1} = B_k + \bar{\bar{V}}. \quad (3.38)$$

CAPÍTULO 4

PROVAS DE CONVERGÊNCIA

4.1 INTRODUÇÃO

Na resolução de problemas de minimização com restrições, uma característica relevante de qualquer algoritmo é que as restrições ativas na solução possam ser identificadas em um número finito de iterações.

Se isto ocorre, então após um número finito de passos, o algoritmo se reduz a um método para minimização irrestrita, e assim, teoremas de convergência local que garantam convergência superlinear ou quadrática podem ser aplicados. Para um método ser competitivo, a sequência $\{x_k\}$ de pontos gerada por ele deve ter, pelo menos, convergência superlinear.

Na resolução de problemas de Programação Não Linear, um método local e um método global obtido a partir desse método local têm comportamentos similares nas vizinhanças da solução x^* .

Considere o problema de minimização irrestrita

$$\begin{array}{ll} \text{Min} & f(x) \\ x \in & \mathbb{R}^n \end{array} \quad (4.1)$$

e o seguinte método local para a resolução desse problema:

Seja S o subespaço das matrizes simétricas com $(2d+1)$ diagonais não nulas.

Sejam $x_0 \in R^n$ uma aproximação inicial da solução e $B_0 \in S$ uma aproximação inicial para a Hessiana .

A partir de x_k e B_k , se obtém x_{k+1} e B_{k+1} pelo seguinte algoritmo:

ALGORITMO 4.1

Passo 1: $x_{k+1} = x_k - B_k^{-1} \nabla f(x_k)$.

Passo 2: $x_{k+1} - x_k = s$.

$y = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$.

B_{k+1} é a solução do problema (3.1).

Friedlander-Martinez-Santos [17] provaram que o algoritmo proposto por eles para resolver o problema ① identifica as restrições ativas em um número finito de passos. Os experimentos numéricos mostraram que são necessárias poucas iterações para identificar corretamente as restrições ativas. Dessa forma, após um número finito de iterações, o método global para minimização com restrições canalizadas dado pelo Algoritmo 2.1 é reduzido a um método global para minimização irrestrita e, nas vizinhanças da solução x^* , o comportamento do método global é semelhante ao do método local dado pelo Algoritmo 4.1.

Portanto é suficiente mostrar que o Algoritmo 4.1 é localmente convergente.

Broyden, Dennis e Moré [1], Dennis e Moré [7, 8], Dennis e Walker [12], Dennis e Schnabel [9, 10] desenvolveram a teoria LSCU (Least Change Secant Update) que envolve as mais conhecidas fórmulas secantes.

Martínez [24] estendeu a teoria LSCU e mostrou que essa teoria ampliada é de grande aplicabilidade. De fato, a maioria dos algoritmos Quase Newton para resolver sistemas algébricos não lineares, problemas de minimização sem restrições e problemas de quadrados mínimos não lineares, podem ser analisados no contexto dessa teoria geral.

Como exemplos, podem ser citados o Primeiro Método de Broyden para resolução de sistemas de equações não lineares, o Método de Davidon-Fletcher-Powell (DFP) , o Método de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) para problemas de minimização irrestrita, e Modificações Secantes para o Método de Gauss-Newton para resolver problemas de quadrados mínimos não lineares.

A idéia fundamental desta teoria ampliada é considerar um espaço X de parâmetros dos quais dependem as matrizes de iteração de cada método, e onde se produzem as projeções que caracterizam os métodos secantes.

A formulação geral desta teoria é para a resolução de sistemas algébricos não lineares $F(x) = 0$, onde $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. A teoria será apresentada aqui no contexto de sistemas não lineares e, posteriormente, se mostra que o Algoritmo 4.1

para minimização irrestrita de uma função $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é um caso particular do modelo de algoritmo proposto por Martínez.

Além do espaço de parâmetros, um método se identifica por uma função de iteração ϕ , que reflete a dependência da aproximação da matriz Jacobiana de F em relação ao parâmetro e ao ponto corrente, e por uma família de variedades afins em X que refletem as características conhecidas *a priori* das matrizes Jacobianas.

4.2 DESCRIÇÃO GERAL DA FAMÍLIA DE MÉTODOS APRESENTADA POR MARTÍNEZ

Seja $F: \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $F = (f_1, \dots, f_n)^T$, $F \in C^1(\Omega)$, Ω um conjunto aberto. Seja X um espaço vetorial de dimensão finita.

Para todo $x, z \in \Omega$, seja $\langle \cdot, \cdot \rangle_{xz}$ um produto escalar em X e $\|\cdot\|_{xz}$ sua norma matricial induzida.

Seja $\|\cdot\|$ uma norma arbitrária em \mathbb{R}^n ou sua norma matricial induzida.

Para todo $x, z \in \Omega$, seja $V = V(x, z)$ uma variedade linear contida em X . Se $x, z \in \Omega$ e $E \subset X$, seja $P_{xz}(E)$ a projeção ortogonal de E em $V(x, z)$ relativa à norma $\|\cdot\|_{xz}$.

Seja $\phi: \Omega \times X \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ uma função contínua.

ALGORITMO 4.2

Sejam x_0 um ponto inicial arbitrário em Ω e $E_0 \in X$.

Dados x_k e E_k , então x_{k+1} e E_{k+1} são obtidos pelos seguintes passos:

Passo 1: Calcule o ponto Quase Newton x_k^Q :

$$z_0 = - \varphi(x_k, E_k)^{-1} F(x_k). \quad (4.2)$$

$$x_k^Q = x_k + z_0. \quad (4.3)$$

Passo 2: Calcule o novo parâmetro de aproximação:

$$E_{k+1} = P_{x_k x_k^Q}(E_k). \quad (4.4)$$

Passo 3: Obtenha x_{k+1} tal que

$$|x_{k+1} - x_k^N| \leq |x_k^Q - x_k^N|, \quad (4.5)$$

sendo x_k^N o ponto de Newton definido por

$$x_k^N = x_k - J(x_k)^{-1} F(x_k), \quad (4.6)$$

$$\text{onde } J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix} \quad \text{é a matriz Jacobiana de } F.$$

4.3 PRINCIPAIS RESULTADOS DE CONVERGÊNCIA DA TEORIA DE MARTÍNEZ

Serão apenas enunciados os resultados principais, e as demonstrações desses resultados podem ser vistas em [24]. O

resultado mais importante dessa teoria é um teorema que mostra a convergência local do Algoritmo 4.2.

São necessárias algumas hipóteses básicas para a obtenção dos resultados principais. A primeira hipótese é relativa à função F .

HIPÓTESE H1

Seja Ω um conjunto aberto, convexo e limitado. Seja $x_* \in \Omega$ tal que $F(x_*) = 0$ e $J(x_*)$ é não singular.

Suponha que existam $p, M > 0$ tais que para todo $x \in \Omega$,

$$|J(x) - J(x_*)| \leq M \|x - x_*\|^p. \quad (4.7)$$

Isto implica que (ver [24])

$$|F(z) - F(x) - J(x_*)(z - x)| \leq M(z - x)\sigma(x, z)^p, \quad (4.8)$$

onde

$$\sigma(x, z) = \max \{ \|x - x_*\|, \|z - x_*\| \}.$$

A segunda hipótese é relativa à função ϕ .

HIPÓTESE H2.

Existe $E_* \in X$ tal que ϕ é continua numa vizinhança de (x_*, E_*) , $\phi(x_*, E_*)$ é não singular e

$$\|I - \phi(x_*, E_*)^{-1} J(x)\| \leq r_* < 1.$$

No que segue, neste capítulo, $\|\cdot\|$ denotará uma norma em X associada ao produto interno \langle, \rangle .

O próximo teorema mostra que se x e E estão suficientemente próximos de x_* e E_* , respectivamente, a aplicação $x \rightarrow \varphi(x, E)^{-1}F(x)$ aproxima o ponto x de x_* com uma taxa próxima de r .

TEOREMA 4.1

Seja $r \in (r_*, 1)$. Suponha que F satisfaça a hipótese H1 e φ satisfaça a hipótese H2. Então existem vizinhanças limitadas Ω_1 e Λ de x_* e E_* , respectivamente, tais que para todo $x \in \Omega_1$, $E \in \Lambda$, $|\varphi(x, E)^{-1}|$ e $\|E\|$ são uniformemente limitados, e

$$|x - \varphi(x, E)^{-1}F(x) - x_*| \leq r|x - x_*|. \quad (4.9)$$

Para simplificar a notação, Ω_1 passará a ser denotado por Ω .

A terceira hipótese é fundamental dentro da teoria que está sendo apresentada. Será suposto que as variedades $V(x, z)$ estão suficientemente próximas de E_* .

HIPÓTESE H3

Suponha que para todo $x, z \in \Omega$ existe $E \in V(x, z)$ tal que

$$\|E - E_*\| \leq c_1 \sigma(x, z)^p, \quad (4.10)$$

sendo p definido por (4.7) e $c_1 > 0$.

A próxima hipótese é referente à relação entre as diferentes normas em X .

HIPÓTESE H4

Existem $q > 0$, $c_2 \geq 0$ tais que, para todo $x, z \in \Omega$, $E \in X$,

$$\|E\|_{xz} \leq k \|E\| \leq k^2 \|E\|_{xz} \quad (4.11)$$

onde $k = 1 + c_2 \sigma(x, z)^q$.

O significado da hipótese anterior é que $\|E\|_{xz}$ está muito próxima de $\|E\|$, quando x e z estão muito próximos de x_* .

No próximo lema são estabelecidas propriedades de deterioração limitada. Os princípios de deterioração limitada foram introduzidos por Dennis [6] e se popularizaram com o trabalho de Broyden, Dennis e Moré[1].

Neste contexto, segundo esses princípios, se tem que a distância entre $P_{xz}(E)$ e E_* não pode ser muito maior que a distância entre E e E_* . Ou seja, a possível deterioração nas aproximações E em relação à E_* ocorre de maneira controlada.

LEMA 4.2

Sejam F , ϕ , V e E_* satisfazendo as hipóteses H1 a H4. Então existem constantes positivas c_3 , c_4 tais que para todo $x, z \in \Omega$ e $E \in X$,

$$\|P_{xz}(E) - E_*\| \leq [1 + c_4 \sigma(x, z)^q] \|E - E_*\| + c_3 \sigma(x, z)^p. \quad (4.12)$$

COROLÁRIO 4.3

Seja $s = \min\{p, q\}$. Existe $c_5 > 0$ tal que

$$\|P_{xz}(E) - E_*\| \leq \|E - E_*\| + c_5 |x - x_*|^s \quad (4.13)$$

sempre que $x, z \in \Omega$, $E \in \Lambda$ e $|z - x_*| \leq |x - x_*|$.

O próximo teorema mostra que o algoritmo 4.2 converge localmente.

TEOREMA 4.4

Sejam F , ϕ , V e E_* , satisfazendo as hipóteses H1 a H4. Suponha que $\{x_k\}$ é definida pelo Algoritmo 4.2 e seja

$r_1 \in (r_*, 1)$. Então existe $\varepsilon = \varepsilon(r_1)$, $\delta = \delta(r_1)$ e $c_6 > 0$ tal que, se $|x_0 - x_*| \leq \varepsilon$, $|E_0 - E_*| \leq \delta$, a sequência gerada pelo Algoritmo 4.2 está bem definida, e para todo $k = 0, 1, \dots$,

$$|x_{k+1} - x_*| \leq r_1 |x_k - x_*|.$$

Além disso, para $j, k = 0, 1, 2, \dots$,

$$\|E_{k+j} - E_*\| \leq \|E_k - E_*\| + c_6 |x_k - x_*|^s, \text{ onde } s = \min\{p, q\}.$$

COROLÁRIO 4.5

Existe $c_7 > 0$ tal que, para $j = 0, 1, \dots$,

$$\|E_{k+j} - E_*\|^2 \leq \|E_k - E_*\|^2 + c_7 |x_k - x_*|^s. \quad (4.14)$$

TEOREMA 4.6

Sob as hipóteses do Teorema 4.4,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \|E_{k+1} - E_k\| = 0.$$

COROLÁRIO 4.7

Sob as hipóteses do Teorema 4.4,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} |\varphi(x_{k+1}, E_{k+1}) - \varphi(x_k, E_k)| = 0. \quad (4.15)$$

O próximo teorema estabelece uma condição tipo Dennis e Moré [7] para a convergência superlinear de uma sequência linearmente convergente gerada pelo Algoritmo 4.2.

TEOREMA 4.8

Sejam F e φ satisfazendo as hipóteses H_1 e H_2 , respectivamente. Suponha que a sequência $\{x_k\}$ gerada pelo Algoritmo 4.2 está bem definida, e que, para algum $r \in (r_*, 1)$ se tem

$$|x_k^0 - x_*| \leq |x_k - x_*|, \quad \text{para } k = 0, 1, 2, \dots$$

Suponha que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|\varphi(x_k, E_k) - \varphi(x_*, E_*)| (x_k^0 - x_k)|}{|x_k^0 - x_k|} = 0 \quad (4.16)$$

Então

$$\overline{\lim}_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_k^0 - x_*|}{|x_k - x_*|} \leq r_* \quad (4.17)$$

e

$$\overline{\lim}_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_{k+1} - x_*|}{|x_k - x_*|} \leq r_* \quad (4.18)$$

COROLÁRIO 4.9

Sob as hipóteses do Teorema 4.8, se $r_* = 0$,
então

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_k^0 - x_*|}{|x_k - x_*|} = \lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_{k+1} - x_*|}{|x_k - x_*|} = 0.$$

Ou seja, a sequência tem convergência q-superlinear.

A hipótese que será estabelecida a seguir representa a propriedade fundamental que define um método secante. Ela estabelece que o algoritmo está fazendo um esforço para obter uma iteração "ideal" e não tentando simplesmente evitar uma deterioração excessiva.

HIPÓTESE H5

A sequência gerada pelo Algoritmo 4.2 satisfaz

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|\varphi(x_{k+1}, E_{k+1}) - \varphi(x_*, E_*)| (x_k^0 - x_k)|}{|x_k^0 - x_k|} = 0. \quad (4.19)$$

Observe-se que se a Equação Secante

$$\phi(x_{k+1}, E_{k+1}) (x_k^0 - x_k) = F(x_k^0) - F(x_k)$$

é satisfeita, a igualdade (4.19) é obtida diretamente de (4.8) e do Teorema 4.8.

TEOREMA 4.10.

Seja $\{x_k\}$ a sequência gerada pelo Algoritmo 4.2 e sejam F, ϕ, V, E^* , e $\{x_k\}$ satisfazendo as Hipóteses H1 a H5. Então existem $\varepsilon, \delta > 0$ tais que, se $|x_0 - x_*| \leq \varepsilon$ e $|E - E^*| \leq \delta$, a sequência $\{x_k\}$ converge para x_* ,

$$\overline{\lim}_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_k^0 - x_*|}{|x_k - x_*|} \leq r_*$$

e

$$\overline{\lim}_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_{k+1} - x_*|}{|x_k - x_*|} \leq r_*.$$

4.4 CONVÊRGENCIA DO MÉTODO LOCAL

Se mostra aqui que o método local apresentado para resolver o problema de minimização irrestrita (4.1) é um caso particular da família de métodos apresentada por Martínez[24].

Se x_* é solução do problema (4.1) então $\nabla f(x_*) = 0$. Consequentemente, resolver o problema (4.1) é equivalente a resolver o sistema de equações não lineares $\nabla f(x_*) = 0$, $\nabla f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Utilizando a simbologia utilizada no Algoritmo (4.2), os elementos do Algoritmo (4.1) são identificados abaixo:

$$F \equiv \nabla f. \quad (4.20)$$

$$X \equiv R^{n \times n}. \quad (4.21)$$

$$J(x) \equiv \nabla^2 f(x) = H(x). \quad (4.22)$$

$$\|\cdot\|_{xz} \equiv \|\cdot\|_F : \text{norma de Frobenius em } R^n, \forall x, z \in R^n. \quad (4.23)$$

Essa norma está associada com o produto interno em $X = R^{n \times n}$ dado por:

$\langle A, B \rangle = \text{tr}(B^T A)$, $A, B \in R^{n \times n}$, onde $\text{tr}(B^T A)$ denota o traço da matriz $B^T A$ (soma dos seus elementos diagonais).

$$|\cdot| \equiv \|\cdot\|_2 : \text{norma euclidiana em } R^n. \quad (4.24)$$

$$\|\cdot\| \equiv \|\cdot\|_F. \quad (4.25)$$

$$V \equiv V(x, z) = S \cap \{B \in X / B(z-x) = \nabla f(z) - \nabla f(x)\}. \quad (4.26)$$

$$\phi(x, B) \equiv B, \quad \forall x \in \Omega. \quad (4.27)$$

$$x_{k+1} \equiv x_k^0. \quad (4.28)$$

$$B_{k+1} \equiv P_{x_k, x_{k+1}}(B_k). \quad (4.29)$$

é a projeção da matriz B_k na variedade $V(x_k, x_{k+1})$, considerando a norma de Frobenius.

Suponha que $\nabla^2 f(x_*) = J(x_*)$ seja não singular e pertença a S ; além disso, suponha que

$$|J(x) - J(x_*)| = |\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(x_*)| \leq M |x - x_*|^p, \quad p > 0,$$

isto é, que a hipótese H1 está satisfeita.

A hipótese H2 está satisfeita com $r_* = 0$, pois

$$\exists B_* = J(x_*) = \nabla^2 f(x_*) \text{ tal que}$$

$$|I - \phi(x_*, B_*)^{-1} J(x_*)| = |I - J^{-1}(x_*) J(x_*)| = 0 = r_*.$$

A hipótese H3 está satisfeita com

$$\tilde{B} = \int_0^1 J(x + t(z - x)) dt, \text{ pois} \quad (4.30)$$

$$\tilde{B} = \left(\int_0^1 J(x + t(z - x)) dt \right) (z - x) = \nabla f(z) - \nabla f(x), \quad \text{isto é, } \tilde{B} \in V(x, z).$$

Além disso, $\tilde{B} \in S$.

$$|\tilde{B} - B_*| = \left| \int_0^1 J(x + t(z - x)) dt - J(x_*) \right| = \left| J\left(\frac{x + z}{2}\right) - J(x_*) \right|.$$

Pela hipótese H1, se tem

$$|\tilde{B} - B_*| \leq M \left| \frac{x + z}{2} - x_* \right|^p = M \left| \frac{x - x_*}{2} + \frac{z - x_*}{2} \right|^p \leq M \left[\left| \frac{x - x_*}{2} \right| + \left| \frac{z - x_*}{2} \right| \right]^p \leq$$

$$M [2 \max\{|x - x_*|, |z - x_*|\}]^p = M 2^p [\max\{|x - x_*|, |z - x_*|\}]^p = M 2^p \sigma(x, z)^p.$$

Como $n^{-1/2} \|A\| \leq |A|$, $\forall A \in X$, (ver [10], pp.44), se segue que

$$\|\tilde{B} - B\| = \|\tilde{B} - B_*\|_F \leq \sqrt{n} |\tilde{B} - B_*| \leq \sqrt{n} M 2^p \sigma(x, z)^p.$$

Portanto,

$$\|\tilde{B} - B\| \leq c_1 \sigma(x, z)^p \quad \text{com } c_1 = \sqrt{n} M 2^p. \quad (4.31)$$

A hipótese H4 é satisfeita trivialmente pois $\|\cdot\| = \|\cdot\|_F$.

A hipótese H5 está satisfeita, pois, como

$$\phi(x_{k+1}, B_{k+1}) = B_{k+1} \in V(x_k, x_{k+1}),$$

então

$$B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = F(x_{k+1}) - F(x_k).$$

Portanto,

$$\varphi(x_{k+1}, B_{k+1}) (x_{k+1} - x_k) = F(x_{k+1}) - F(x_k).$$

Conclue-se portanto, que o Algoritmo (4.1) é superlinearmente convergente.

CAPÍTULO 5

EXPERIMENTOS NUMÉRICOS, CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

5.1 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Para analisar o comportamento do algoritmo foram efetuados vários experimentos numéricos. Os testes foram realizados em uma SUN workstation SPARC IPX da UFSC. Os programas foram implementados em linguagem Fortran 77, utilizando precisão dupla.

As funções testes utilizadas foram obtidas em [28] ('Testing Unconstrained Optimization', de Moré-Garbow-Hillstorn) e em [5] ('Testing a Class of Methods for Minimization Problems with Simple Bounds on the Variables', de Conn-Gould-Toint). Entretanto, os testes efetuados por Conn-Gould-Toint eram para problemas de menor dimensão. O número de variáveis consideradas no trabalho desses autores era, no máximo, igual a 45.

Na implementação do algoritmo, os problemas de minimização sem restrições são considerados como caso particular do problema

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.a} & l(i) \leq x(i) \leq u(i) \end{array} ,$$

considerando-se os limitantes $l(i)$ adequadamente pequenos e os limitantes $u(i)$ suficientemente grandes, para todo $i \in \{1, \dots, n\}$. Foram considerados $l(i) = -10^4$ e $u(i) = 10^4$, $\forall i \in \{1, \dots, n\}$.

Na maioria dos casos cada função teste foi utilizada inicialmente para resolver um problema de minimização irrestrita, com aproximações das Hessianas tridiagonais e pentadiagonais. Posteriormente, foram acrescentadas restrições canalizadas e resolvido um problema com restrições canalizadas, sendo também utilizadas aproximações das Hessianas tridiagonais e pentadiagonais. As restrições canalizadas são as mesmas propostas por Conn-Gould-Toint [5]:

$$(x^*)_i + 0.1 \leq x_i \leq (x^*)_i + 1.1, \text{ se } i \text{ é ímpar.}$$

$$-100.0 \leq x_i \leq 100.0, \text{ se } i \text{ é par,}$$

sendo x^* o ponto de ótimo obtido no problema sem restrições.

O ponto inicial para o problema com restrições canalizadas é a projeção do ponto inicial do problema de minimização irrestrita na região viável do problema com restrições canalizadas.

Em todos os testes, a aproximação inicial da matriz Hessiana é a matriz Identidade.

Na implementação do algoritmo 2.1 foram definidos os seguintes parâmetros:

$$\|\cdot\|_{\#} = \|\cdot\|_{\infty}, \quad (\|v\|_{\infty} = \text{máximo}\{|v_1|, \dots, |v_n|\}),$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = 0.5, \quad \alpha = 10^{-4}, \quad \theta = 1, \quad D_k = I,$$

$$\Delta^0 = 10 \quad \text{e} \quad \Delta_{\min} = 0.5.$$

O critério principal de parada do algoritmo é que a norma infinito do gradiente da função objetivo projetado na caixa seja menor que 10^{-6} . Além disso, o número máximo permitido de iterações da subrotina principal do algoritmo é 600, no caso sem restrições, e 300 no caso com restrições. Outro critério adicional de parada é o seguinte: seja x_c a aproximação da solução x na iteração corrente; o programa pára se o raio da região de confiança se torna menor que 10^{-16} (que é a tolerância estabelecida para a região de confiança) e, considerando a direção da projeção de $-\nabla f(x_c)$ na região viável da iteração corrente, não foi possível obter o decréscimo da função objetivo f estabelecido pela Condição de Armijo.

Na apresentação dos resultados obtidos se utiliza a seguinte simbologia:

N : número de variáveis independentes.

$\|\text{gr.proj.}\|_{\infty}$: norma infinito do gradiente projetado da função objetivo f .

F.O.: valor da função objetivo na solução obtida.

Aval. f : número de avaliações da função objetivo .

Iterações: número de iterações da subrotina principal do algoritmo.

Tempo : tempo de CPU em segundos.

> 600 (na coluna de Iterações):significa que o programa parou por ter atingido o número máximo de iterações permitido no caso sem restrições.

> 300 (na coluna de Iterações): significa que o programa parou por ter atingido o número máximo de iterações permitido no caso com restrições.

(na coluna do N): significa que o programa parou porque o raio da região de confiança se tornou menor que a tolerância estabelecida e não foi possível obter decréscimo da função na direção da projeção de $-\nabla f(x_c)$ na região viável

A seguir são apresentados os resultados dos testes realizados.

1- Função Estendida de Rosenbrock [5 e 28].

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n/2} [100(x_{2i} - x_{2i-1}^2)^2 + (1 - x_{2i-1})^2], \text{ onde } n \text{ é par.}$$

[a]- Minimização sem Restrições:

Valor Ótimo (esperado) da função objetivo: $f = 0$ em $x_* = (1, \dots, 1)$.

Aproximação inicial: $x = (-1.2, 1, -1.2, 1, \dots, -1.2, 1)$.

[a.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 1

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	5.71d-7	1.88d-14	127	50	9.9d-2
8	2.69d-9	1.28d-17	230	72	0.38
20	7.46d-7	4.7d-16	238	75	1.46
100	9.56d-8	2.d-17	441	105	22.89
200	4.99d-7	5.59d-13	452	97	63.41
500	7.83d-7	6.12d-13	554	130	258.85
1000	8.39d-8	2.86d-14	620	127	725

[a.2]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Tabela 2

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	1.64d-8	9.08d-18	928	201	1.63
20	2.58d-7	9.13d-15	1250	211	9.26
100	5.79d-7	2.71d-13	2879	407	252.8
200	8.37d-7	2.45d-12	2614	372	522.98
500	7.60d-7	1.02d-12	3787	394	2514.6
1000	2.68d-6	3.12d-7	12025	>600	16428

[b]- Minimização com Restrições Canalizadas:

[b.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 3

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	0	1.99d-2	27	7	0.12
8	0	3.99d-2	43	15	0.18
20	0	1.d-1	38	14	0.22
100	0	0.49	69	21	3.13
200	0	0.99	60	18	6.88
500	0	2.5	44	16	4.15
1000	0	4.99	45	18	8.03

[b.2]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Observação: Para $N = 1000$, o problema foi resolvido com a aproximação da solução x obtida na iteração 600 do problema irrestrito.

Tabela 4

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	0	3.9d-2	49	15	0.129
20	0	1.d-1	75	19	0.50
100	0	0.5	95	26	6.34
200	0	0.99	109	31	19.63
500	0	2.5	25	30	59.31
1000	0	4.99	105	28	170.43

2- Função Singular Estendida de Powell ([5 e 28]).

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n/4} [(x_{4i-3} + 10x_{4i-2})^2 + 5(x_{4i-1} - x_{4i})^2 + (x_{4i-2} - 2x_{4i-1})^4 + 10(x_{4i-3} - x_{4i})^4]$$

sendo n um múltiplo de 4.

[a]- Minimização sem Restrições:

Valor Ótimo da função objetivo: $f = 0$ em $x^* = (0, \dots, 0)$.

Aproximação Inicial $x = (3, -1, 0, 1, \dots, 3, -1, 0, 1)$.

[a.1]- Resultados Obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 5

N	$\ gr.pr.\ _\infty$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	8.74d-7	3.81d-10	135	44	0.14
8	9.3d-7	7.61d-10	241	61	0.51
20	5.74d-7	8.75d-10	471	104	3.49
100	9.48d-7	4.52d-9	821	141	96.72
200	6.13d-7	4.60d-9	1044	161	302.60
500	9.87d-7	1.7d-9	1689	247	1463.2
1000	9.21d-7	1.48d-8	1134	168	2352.4

[a.2]- Resultados Obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Tabela 6

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	8.14d-7	1.14d-9	871	151	1.45
20	8.08d-7	1.24d-9	1979	279	16.41
100	1.44d-5	3.72d-8	5698	>600	775.36
200	9.92d-6	1.31d-8	6496	>600	2190.0
500	5.7d-7	1.36d-8	4.997	489	4911.4
1000	2.10-5	3.004	6509	>600	14807.

[b]- Minimização com Restrições Canalizadas:

[b.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 7

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	7.55d-7	1.92d-3	12	4	3.d-2
8	2.45d-3	3.75d-3	48	16	0.109
20	1.26	0.44	1354	>300	16.61
100	6.85d-9	4.9d-2	45	16	1.46
200	7.54d-9	9.66d-2	63	18	3.18
500	3.9d-10	0.2245	41	14	9.3
1000	8.81	43.14	1454	>300	3652

[b.2]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Como em [a.2], para $N = 100, 200$ e 1000 , o algoritmo não convergiu em 600 iterações, para esses valores de N os problemas com restrições canalizadas foram gerados da seguinte forma: para $N = 100$ foi retirada a condição de número máximo de iterações, e resolvido novamente o problema para o caso irrestrito com aproximações das Hessianas pentadiagonais; o ponto de ótimo x^* foi obtido na iteração 673, e esse ponto foi utilizado para resolver o problema canalizado. Para $N = 200$ e $N = 1000$ o problema com restrições canalizadas foi gerado com a aproximação da solução x^* obtido na iteração 600.

Tabela 8

N	$\ gr.pr.\ _\infty$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	6.5d-7	47.61	23	12	9.9d-2
20	7.88d-7	9.57d-3	36	11	0.359
100	4.32d-7	4.78d-2	43	15	1.18
200	4.68d-7	9.63d-2	37	12	1.35
500	2.46d-7	0.23	38	14	3.24
1000	4.8d-7	3.12d-13	805	108	1159.4

3- Função Trigonométrica [28]).

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \left[n - \sum_{j=1}^n \cos x_j + i(1 - \cos x_i) - \sin x_i \right]^2.$$

Valor Ótimo da função objetivo: $f = 0$ em $x_* = (0, \dots, 0)$.

Aproximação Inicial: $x = (1/n, 1/n, \dots, 1/n)$.

[a]- Minimização sem Restrições:

[a.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 9

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	6.96d-7	3.2d-4	16	14	5.d-2
8	7.57d-7	1.10d-5	427	60	0.68
20	9.84d-7	1.29d-5	1128	110	6.03
100	9.99d-7	4.47d-7	4993	313	276.98
200	9.71d-7	5.32d-7	5165	307	762.62
500	8.9d-7	3.63d-7	7691	389	3789
1000	4.06d-6	1.79d-7	13092	>600	16151

[a.2]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Tabela 10

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	9.27d-7	1.10d-5	97	27	0.21
20	6.67d-7	6.86d-6	943	101	4.61
100	8.7d-7	1.91d-6	2191	160	94.34
200	8.59d-7	6.21d-7	2090	141	245.82
500	9.9d-7	4.42d-7	3063	212	1601.7
1000	2.68d-6	3.12d-7	12025	>600	16427

[b]-Minimização com Restrições Canalizadas:

Obs:Para N = 1000 será utilizado x_* obtido na iteração 600.

[b.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 11

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	5.57d-7	1.90d-2	10	8	3.9d-2
8	9.85d-7	1.66d-2	53	8	7.9d-2
20	3.93d-7	0.1055	9	6	7.9d-2
100 #	1.18d-6	17.08	292	18	3.01
200 #	7.86d-6	135.930	229	12	4.98
500 #	7.87d-5	2128.7	399	19	22.91
1000#	2.78d-4	1675.12	1488	40	258.77

[b.2]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Tabela 12

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	6.24d-7	1.66d-2	7	6	0.31
20	2.52d-7	0.2342	42	9	0.43
100	8.48d-7	18.20	62	9	1.25
200#	7.93d-6	138.75	337	20	12.23
500	2.13d-5	2116.07	371	22	42.24
1000	2.74d-3	16.810	470	13	304.57

4- Função Associada ao Problema de Contorno Discretizado[28].

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \left[2x_i - x_{i-1} - x_{i+1} + \frac{1}{2}h^2(x_i + t_i + 1)^3 \right]^2,$$

onde $h = 1/(n+1)$, $t_i = ih$, $x_0 = x_{n+1} = 0$.

Valor Ótimo da função objetivo: $f = 0$.

Aproximação Inicial: $x = (\xi_i)$ onde $\xi_i = t_i(t_i - 1)$,

$\forall i = 1, \dots, n$.

[a.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 13

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	2.59d-7	1.01d-14	86	16	0.168
8	8.99d-7	9.36d-13	228	34	0.28
20	8.47d-7	1.06d-10	2003	226	9.98
100	2.24d-5	7.51d-7	9008	>600	581.13
200	1.94d-5	1.04d-7	11737	>600	2530

[a.2]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Tabela 14

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	6.77d-7	6.3d-13	57	17	0.12
20	6.62d-7	1.4d-11	255	43	2.5
100	9.96d-7	2.78d-8	2525	320	506.6
200	4.9d-7	8.94d-8	2022	190	821.2
500	9.03d-7	9.5d-9	1201	65	1107.5

[b]- Minimização com Restrições Canalizadas:

[b.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais: (Para $N = 100$ e 200 foram utilizados os resultados obtidos na iteração 600 em [a.1]).

Tabela 15

N	$\ gr.pr.\ _x$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	4.86d-7	1.30d-2	26	14	4.9d-2
8	9.38d-7	5.61d-3	119	24	0.189
20	6.85d-7	2.15d-3	923	131	5.05
100	8.56d-4	7.43d-4	5607	>600	512.46
200	1.06d-3	7.51d-4	6657	>600	1867.2

[b.2]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Tabela 16

N	$\ gr.pr.\ _x$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	3.66d-7	5.61d-3	60	19	0.16
20	2.96d-7	2.97d-7	153	35	1.95
100	9.87d-7	4.95d-4	1050	290	219.9
200	2.19d-5	4.17d-4	2050	>600	1065.8

5- Função Linear (posto máximo) [28].

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \left[x_i - \frac{2}{n} \left(\sum_{j=1}^n x_j \right) - 1 \right]^2.$$

Valor Ótimo da função objetivo: $f = 0$ em $x^* = (-1, -1, \dots, -1)$.

Aproximação Inicial: $x = (1, 1, \dots, 1, 1)$.

[a.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais:

Tabela 17

N	$\ gr.pr.\ _x$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	4.56d-7	6.57d-14	97	25	6.d-2
8	8.54d-7	3.88d-13	363	51	0.45
20#	2.67d-3	7.36d-7	824	92	3.92
100#	3.5d-2	5.91d-5	2974	317	322.86
200	3.36d-2	1.63d-2	5087	>600	2166.9
500	9.13d-2	4.24d-2	4506	>600	6427.2

[a.2]- Resultados Obtidos com Aproximações de Banda Pentadiagonais:

Tabela 18

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
8	8.02d-7	3.61d-13	263	53	0.4
20	5.86d-7	8.9d-13	1376	172	7.31
#100	3.50 d-2	5.91d-5	2974	317	326.88
#200	2.46d-2	1.66d-4	4381	462	1145.1
500	6.89d-2	3.45d-2	4440	>600	5584.2

[b]- Minimização com Restrições Canalizadas:

[b.1]- Resultados obtidos com Aproximações de Banda Tridiagonais para os casos onde houve convergência no caso [a.1]:

Tabela 19

N	$\ gr.pr.\ _{\infty}$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
#4	0.44	2.13d-2	136	8	7.9d-2
#8	1.16	4.88	126	7	0.1

$$6- f(x) = 2 - \prod_{i=1}^n x_i / n! \quad (\text{ver}[5]).$$

(Uma generalização do problema 45 de Hock e Schittkowski).

Restrições: $0 \leq x_i \leq i, \forall i / 1 \leq i \leq n$.

Aproximação Inicial: $x = (2, 2, \dots, 2)$.

Valor Ótimo da função objetivo: $f = 1$ em $x_* = (1, 2, \dots, n)$.

Tabela 20

N	$\ gr.pr.\ _\infty$	F.O.	Aval. f	Iterações	Tempo
4	0	1	4	3	1.9d-2
8	0	1	7	6	1.9d-2

Observação: Para valores maiores de N, o ponto inicial já satisfaz a condição principal de convergência. Seria necessário impor que a norma do gradiente projetado fosse menor do que o utilizado.

$$7- f(x) = x^T A x, \text{ onde } x \in R^n, A \in R^{n \times n}, A = \text{diag}(1, 2, \dots, n).$$

$$n = 5000$$

Aproximação Inicial: $x_0 = (50, 50, \dots, 50)$.

Valor Ótimo da função objetivo: $f = 0$ em $x_* = (0, \dots, 0)$.

O objetivo deste teste era comparar o resultado com o resultado obtido pelo algoritmo de Friedlander-Martinez-Santos [17]. No caso de minimização de quadráticas , quando se utilizam as matrizes hessianas verdadeiras , o método de Martínez-Friedlander-Santos converge numa única iteração da subrotina Box (subrotina central do algoritmo).

Com as aproximações das hessianas utilizadas nesse trabalho, o algoritmo convergiu em duas iterações da subrotina Box. Os testes foram realizados com aproximações das hessianas diagonais, tridiagonais e pentadiagonais obtendo os mesmos resultados em todos os casos , com exceção do tempo de execução:

$x^* = (0, 0, \dots, 0, 0)$

Valor da função objetivo: $f = 0$

Norma infinito do gradiente projetado : 0

Número de avaliações da função objetivo : 3

Tempo de execução do Algoritmo:

a) Aproximações de Banda Diagonais: 1.69 segundos..

b) Aproximações de Banda Tridiagonais: 2.06 segundos.

c) Aproximações de Banda Pentadiagonais: 2.41 segundos.

5.2 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O algoritmo se mostrou eficiente para resolver a maioria dos problemas testados. Mesmo em casos em que não houve

convergência alguns resultados podem ser considerados bons; por exemplo, a Função Singular Estendida de Powell, com $N = 100$ e aproximações Hessianas pentadiagonais (caso [a.2]), não convergiu com o número máximo permitido de iterações, mas se for relaxado esse critério de parada se obtém o seguinte resultado: convergência na iteração 673, com $\|gr.pr\|_{\infty} = 9.13d-7$, F.O. = $3.72d-8$, Aval. $f = 6546$ e Tempo = 981.2 segundos. A forma de executar os testes, exigindo que a norma do gradiente projetado seja menor do que 10^{-6} , foi bastante rigorosa, pois não permitiu que se declarasse convergência mesmo quando o valor da função objetivo estava próximo do valor verdadeiro. Isso foi feito porque em muitos problemas reais não se tem uma estimativa razoável do valor esperado da f e será necessário esse tipo de exigência.

A grande vantagem do método é que não se requer o cálculo das Hessianas verdadeiras, e o armazenamento necessário para as aproximações de banda pode ser muito menor, quando se considera N grande e aproximações tridiagonais ou pentadiagonais.

Não foram feitos testes utilizando um número maior de diagonais, e isso deverá ser feito posteriormente; o número de diagonais não nulas acima da diagonal principal é um parâmetro na implementação do método. Os resultados com aproximações diagonais das Hessianas não foram satisfatórios (com exceção da função quadrática do problema 7), o que já era esperado.

Do ponto de vista do usuário a grande vantagem é que é suficiente calcular o gradiente de cada função a ser

utilizada. Além disso, depois de sucessivas análises, a maioria dos parâmetros utilizados no algoritmo de Friedlander-Martínez-Santos tem seus valores definidos ou sugeridos.

A desvantagem apresentada pelo algoritmo é que o trabalho computacional aumenta à medida que N cresce, pois nos testes se verificou, em quase todos os casos, que o número de iterações, e principalmente o número de avaliações de f , aumenta quando N aumenta. Provavelmente isso vai depender da complexidade da função objetivo. Com funções quadráticas, que são muito usuais em problemas práticos, o algoritmo convergiu rapidamente, apesar de N ser grande.

Os testes com o algoritmo devem prosseguir, e espera-se fazer uma análise mais adequada da influência nos resultados do número de diagonais utilizado. Além disso essas aproximações de banda para as Hessianas deverão ser testadas num caso mais geral, em que são utilizadas restrições não lineares. O algoritmo de região de confiança de Friedlander-Martínez-Santos foi estendido para esse caso mais geral, o que permitirá essa análise.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 BROYDEN, C.G; DENNIS , J.E. Jr; MOREÉ, J.J. [1973]: *On the local and superlinear convergence of Quasi-Newton methods*, J. Inst. Math. Appl. 12, p. 223-245.
- 2 BUCKLEY, A.; LENIR, A. [1983]: *QN-Like variable storage conjugate gradients*, Mathematical Programming 27, p. 155-175.
- 3 _____ [1985]: *BBVSCG - A variable storage algorithm minimization*, ACM Transactions on Mathematical Software 11/2, p. 103-119.
- 4 CONN, A. R.; GOULD, N. I. M.; TOINT, Ph. L. [1988]: *Global Convergence of a class of trust region algorithms for optimization with simple bounds*, SIAM Journal on Numerical Analysis 25, p. 433-245.
- 5 _____ [1989]: *Testing a class of methods for solving minimization problems with simple bounds on the variables*, Mathematics of Computation 50, p. 399-430.
- 6 DENNIS, J. E.Jr. [1971]: *Towards a unified convergence theory for Newton-like methods*. Nonlinear Functional Analysis and Applications , Academic Press, Nova York, p. 425-472.
- 7 DENNIS, J. E. Jr.; MOREÉ, J. J. [1974]: *A characterization of superlinear convergence and its application to Quasi-Newton Methods*, Math. Comp. 28, p. 549-560.
- 8 _____ [1977]: *Quasi-Newton Methods, motivation and theory*, SIAM Review 19, p. 46-89.

- 9 DENNIS, J. E. Jr.; SCHNABEL, R. B., [1979]: *Least change secant updates for Quasi-Newton methods*, SIAM Review 21, p. 443-459.
- 10 _____ [1983]: *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice Hall Englewood Cliffs, New Jersey.
- 11 _____ [1989]: *A View of Unconstrained Optimization*, chapter 1, in *Optimization (v. 1)*, Handbooks in Operations Research Management Science, G. L. Nemhauser, A. H. G.; Rinnoy Kan and M. J. Todd. (Eds.) North-Holland, Amsterdam-New York-Oxford-Tokyo.
- 12 DENNIS, J. E. Jr and WALKER, H. F. [1981]: *Convergence theorems for least-change secant update Methods*, SIAM J. on Num. Anal. 18, p. 949-987.
- 13 DONGARRA, J. J.; BUNCH J. R.; MOLER, C. B.; STEWART, G. W. [1979]: *LINPACK Users Guide*, SIAM Publications, Philadelphia.
- 14 DUFF, I. S.; ERISMAN, A. M.; REID, J. K. [1986]: *Direct methods for sparse matrices*, Clarendon Press, Oxford.
- 15 FIACCO, A.V.; MCCORMICK, G. P. [1968]: *Nonlinear Programming Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, John Wiley and Sons, Inc, New York - London - Sidney - Toronto.
- 16 FLETCHER, R. [1987]: *Practical Methods of Optimization* (2nd edition), John Wiley and Sons, Chichester - New York - Brisbane - Toronto - Singapore.

- 17 FRIEDLANDER, A.; MARTÍNEZ J. M.; SANTOS, S. A. [1994]: A new-trust region algorithm for bound constrained minimization, *Applied Mathematics and Optimization* 30, p. 235-266.
- 18 GAY, D. M. [1981]: Computing optimal locally constrained steps, *SIAM J. Sci., Stat. Comput.* 2, p. 186-197.
- 19 GILBERT, J. C.; LEMARÉCHAL, C. [1988]: Some numerical experiments with variable storage Quasi-Newton algorithms, *IISA Working Paper WP-88, A - 2361*, Luxembourg.
- 20 GILL, P. E.; MURRAY, E.; WRIGHT, M. H. [1981]: *Practical Optimization*, Academic Press, London - New York.
- 21 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, Ch. F. [1991]: *Matrix Computation* (2nd edition). The John Hopkins University Press, Baltimore - London.
- 22 LIU, D. C.; NOCEDAL, J. [1988]: On the limited memory BFGS method for large scale optimization, *TRNEM 03*, Northwestern University, Dept. Electrical Engineering and Computer Science.
- 23 LUENBERGER, D. G. [1984]: *Linear and Nonlinear Programming* (2nd edition). Addison - Wesley Publishing Company.
- 24 MARTÍNEZ, J. M. [1990]: Local convergence theory of Inexact Newton methods based on structured least change updates, *Mathematics of Computation* 55, p. 143-167.
- 25 MARTÍNEZ, J. M.; SANTOS, S. A. [1995]: A trust region strategy for minimization on arbitrary domains, *Mathematical Programming* 68, p. 267-302

- 26 McCORMICK, G. P. [1983]: *Nonlinear Programming*, John Wiley and Sons, New York - Chichester - Brisbane - Toronto - Singapore.
- 27 MEURANT, Gérard [1992]: *The evolution of computing on parallel computers*, Anais da I Escola de Computação Científica de Alto Desempenho, 3 a 7 de agosto de 1992, LNCC - Rio de Janeiro.
- 28 MOREÉ, J. J.; GARBOW, B. S.; HILLSTRON, K. E. [1981]: *Testing unconstrained optimization software*, ACM Transactions on Mathematical Software 7, p. 17-41.
- 29 MOREÉ, J. J.; SORENSEN, D. C. [1983]: *Computing a trust region step*, SIAM J. Sci, Stat. Comput. 4, p. 553-572.
- 30 NOCEDAL, J. [1980]: *Updating Quasi-Newton matrices with limited storage*, Mathematics of Computation, p. 773-782.
- 31 POWELL, M. J. D. [1984]: *On the global convergence of trust region algorithms for unconstrained minimization*, Mathematical Programming 29, p. 297-303.
- 32 REDDY, J. N. [1987]: *The penalty-finite element*, in Finite Element Handbook, :H Kardestuncer (End.), McGraw Hill Book Company.
- 33 SCHULTZ, G. A.; R. B. SCHNABEL and R. H. BYRD [1985]: *A family of trust region based algorithms for unconstrained minimization with strong global convergence properties*, SIAM J. Num. Anal. 22, p. 47-67.
- 34 SORENSEN, D. C. [1982]: *Newton's method with a model trust region modification*, SIAM J. Numer. Anal. 19, p. 409-426.

- 35 STRANG, G. [1988]: *Linear Algebra and its Applications* (3rd edition), Harcourt Brace Jovanovich Publishers, San Diego.
- 36 STEIHAUG, T. [1983]: *The conjugate gradient method and trust regions in large scale optimization*, SIAM J. Numer. Anal. 20, p. 626-637.
- 37 TOINT, Ph. L. [1988]: *Global convergence of a class of trust-region methods for nonconvex minimization in Hilbert space*, IMA Journal of Numerical Analysis 8, p. 231-252.
- 38 TOUATI-AHMED, D.; STOREY, C. [1990]: *Efficient hybrid conjugate gradient techniques*, JOTA, vol. 64-2.
- 39 WATKINS, D. S. [1991]: *Fundamentals of Matrix Computations*, John Wiley and Sons, Inc, New-York - Toronto.
- 40 ZAMBALDI, M. C. [1993]: *Novos Resultados Sobre Fórmulas Secantes e Aplicações - Tese de Doutorado - DMA - IMECC - UNICAMP - Campinas - São Paulo.*